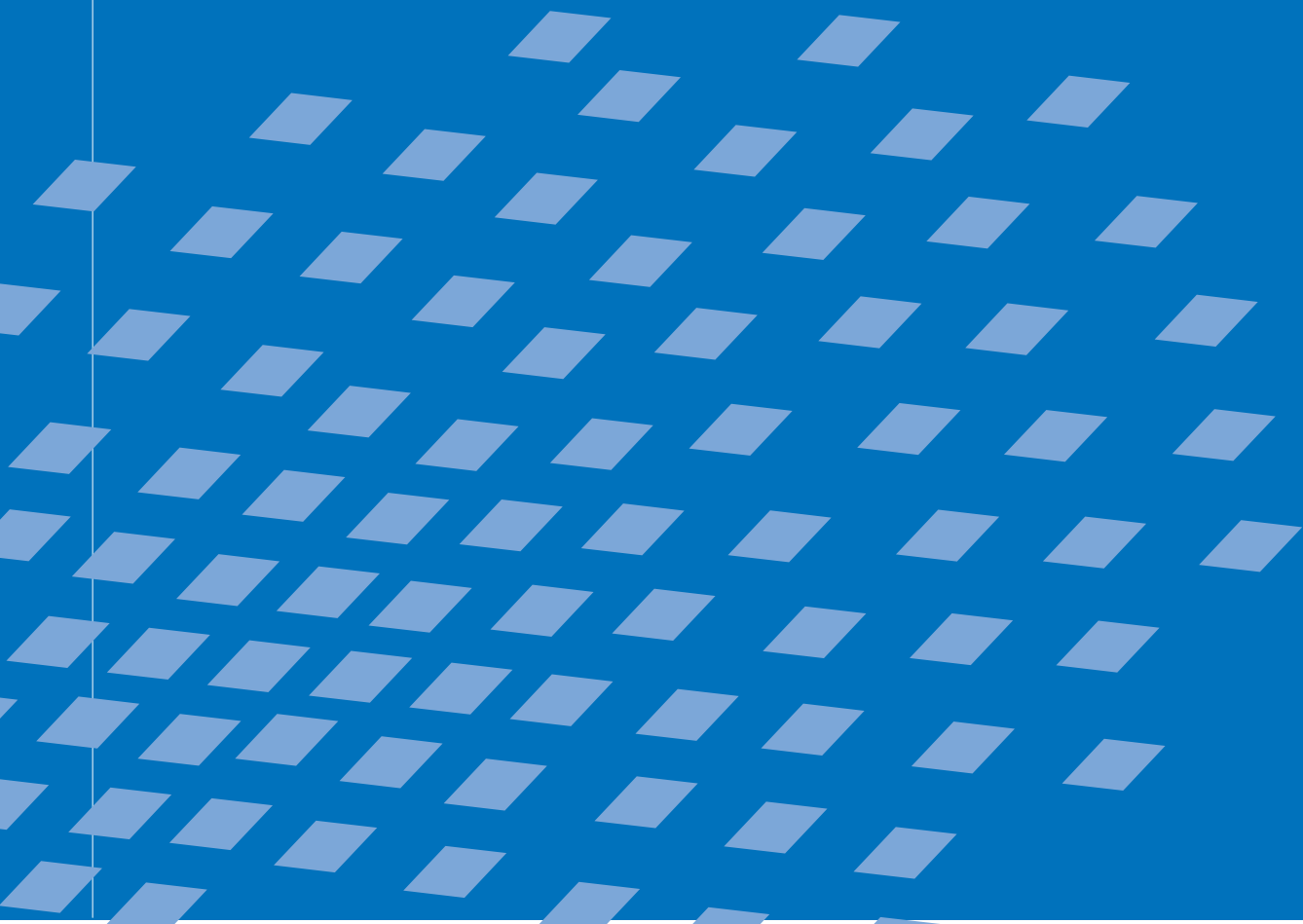




Effiziente Lösungsstrategien in der nichtlinearen Schalenmechanik

Michael Gee



Effiziente Lösungsstrategien in der nichtlinearen Schalenmechanik

von

Michael Gee

Bericht Nr. 43 (2004)
Institut für Baustatik der Universität Stuttgart
Professor Dr.-Ing. E. Ramm
Stuttgart 2004



© Michael Gee

Berichte können bezogen werden über:

Institut für Baustatik

Universität Stuttgart

Pfaffenwaldring 7

D-70550 Stuttgart

Tel.: 07 11 / 6 85 61 23

Fax: 07 11 / 6 85 61 30

<http://www.uni-stuttgart.de/ibs/>

Effiziente Lösungsstrategien in der nichtlinearen Schalenmechanik

Von der Fakultät Bau- und Umweltwissenschaften
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Michael Gee

aus Esslingen am Neckar

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. Dr. h.c. Ekkehard Ramm

Mitberichter: o. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. Ulrich Langer

Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. Wolfgang A. Wall

Tag der mündlichen Prüfung: 22. Juli 2004

Zusammenfassung

Numerische und algorithmische Aspekte der Berechnung dünnwandiger Schalenträgerwerke mit der Methode der Finiten Elemente werden hier diskutiert. Dabei liegt das Augenmerk auf der Auswahl und Gestaltung von Methoden, die eine effiziente Behandlung der aus der 7-Parameter-Schalenformulierung von Büchter und Ramm (1992) resultierenden Gleichungen auf Parallelrechnern erlauben. Hierzu werden parallele iterative Lösungsstrategien im Rahmen eines neuen Softwarekonzepts eingesetzt, deren Effizienz jedoch maßgeblich von der den Gleichungen zugrundeliegenden Mechanik der Schalenträgerwerke beeinflusst wird.

Mit finiten Elementen diskretisierte Schalen führen zu schlecht konditionierten Gleichungssystemen, was an die Vorkonditionierung der iterativen Lösung besondere Herausforderungen stellt. Die Konditionierung der Gleichungssysteme verschlechtert sich zusätzlich, wenn wie bei der genannten Schalenformulierung die Dickenänderung der Schale berücksichtigt wird und die Parametrisierung der Schalenrotationen und der Dickenänderung über Differenzverschiebungen zwischen Schalenober- und Mittelfläche erfolgt.

Es wird eine Vorkonditionierungsstrategie vorgestellt, die zwei Ansätze miteinander kombiniert. Der erste Ansatz ist eine mechanisch motivierte Verbesserung der Konditionierung der Elementmatrizen durch eine Skalierung des Schalendirektors. Hierdurch wird die aus der Parametrisierung resultierende zusätzliche Verschlechterung der Kondition behoben. Der zweite Ansatz ist eine parallele semi-algebraische Aggregations-Multigrid-Vorkonditionierung auf der Basis überlappender Gebietszerlegung nach Vanek et al. (2001). Dabei werden sogenannte disjunkte Aggregate aus Knotenblöcken der Systemmatrix gebildet, die auf größeren Leveln wiederum durch einen Knotenblock repräsentiert werden. Die Methode erlaubt den Verzicht auf Grobdiskretisierungen und konstruiert die Transferoperatoren zwischen den Leveln auf der Basis der Starrkörpermoden der ungelagerten Struktur.

Die Berücksichtigung der Schalendickenänderung erlaubt die Modellierung von Kontaktnebenbedingungen für die Schalenoberflächen. Aufbauend auf der in Laursen (2002) gegebenen kontinuumsmechanische Kontaktbehandlung wird eine Knoten-Segment-Diskretisierung des (Selbst-)Kontakts für die Schalenformulierung bei großen Deformationen und Reibung gegeben. Die nötige Regularisierung der Kontaktnebenbedingungen wird mit der Methode der Augmented-Lagrange-Multiplikatoren realisiert. Für die Kontaktsuche wird ein mehrphasiges Konzept vorgeschlagen, das einerseits von der Annahme der Dünnwandigkeit der Strukturen zur Effizienzsteigerung Gebrauch macht, aber auch die aus der Dünnwandigkeit resultierenden besonderen Schwierigkeiten berücksichtigt.

Eine Reihe numerischer Beispiele demonstriert die Anwendbarkeit und Leistungsfähigkeit der behandelten und vorgestellten Ansätze.

Abstract

Numerical and algorithmic aspects of simulating the behaviour of thin-walled shell structures using finite element methods are discussed. Attention is focussed upon choice and layout of methods allowing for an efficient treatment of equations resulting from the 7-parameter shell model by Büchter and Ramm (1992) applying parallel computers. Parallel iterative solution methods are considered in a software framework proposed here. However, their efficiency is significantly influenced by the underlying mechanics of the shell structures.

Shells discretised by finite elements result in ill-conditioned systems of equations and therefore pose a great challenge to the preconditioner of the iterative solver. With the shell model mentioned above the situation further deteriorates, as the thickness change of the shell is taken into account and the parametrisation of rotations and thickness change is done by relative displacements between the upper- and the mid-surface of the shell.

A preconditioner is presented combining two approaches in a parallel, domain decomposition based framework. The first approach is a mechanically motivated improvement of the conditioning of the resulting element matrices by scaling the director field of the shell. By this the extra ill-conditioning from the above mentioned parametrisation can be removed. The second approach is a semi-algebraic multigrid preconditioner based on Smoothed Aggregation following Vanek et al. (2002). Disjoint so-called aggregates of nodal blocks of the system matrix are formed which then can be represented on a coarser level by a single nodal block. The method abandons the need for explicit coarse discretisations and constructs interlevel transfer operators upon the rigid body modes of the unconstrained structure.

Consideration of thickness change in the shell formulation allows for contact constraints on the shell surfaces. Based on the continuum contact framework in Laursen (2002), a node-to-segment discretisation of (self-)contact for the 7-parameter shell model including finite deformations and friction is presented. The required regularisation of contact constraints is done by augmented Lagrangean multipliers. A multi-phase concept for the contact search algorithms is proposed that makes use of the slenderness assumption of the structure to improve efficiency but also considers the challenges resulting from this property.

A series of numerical examples demonstrates the applicability and effectiveness of the considered approaches.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand in den Jahren 1999 bis 2004 während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Baustatik der Universität Stuttgart.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.–Ing. Dr.–Ing. E.h. Dr. h.c. Ekkehard Ramm für die Aufnahme an diesem Institut, seinen motivierenden Führungsstil, die fachlichen und außerfachlichen guten Gespräche und Zusammenarbeit und nicht zuletzt für die Offenheit und gegebene Entwicklungsfreiheit in der Forschung und Entwicklung. Seine hervorragenden Fähigkeiten als Hochschullehrer sind es, die während des Diplomstudiums meine Faszination für die 'Computational Mechanics' überhaupt erst geweckt haben.

Besonderer Dank gilt auch Herrn Prof. Dr.–Ing. Wolfgang A. Wall nicht nur für die Übernahme des Mitberichts, sondern vor allem für die Begleitung dieser Arbeit in menschlicher und fachlicher Hinsicht. Die vielen fachlichen und sonstigen Diskussionen und Gespräche waren eine nie versiegende Quelle der Anregungen und Motivation.

Herrn Prof. Dipl.–Ing. Dr. Ulrich Langer danke ich herzlich für die Übernahme des Mitberichts. Sein aufrichtiges Interesse an meiner Arbeit und die geleisteten Hilfestellungen haben mich sehr gefreut.

Ich danke allen Kollegen, die mich während meiner Zeit am Institut für Baustatik begleitet haben. Insbesondere danke ich Andreas Lipka für die vielen Gespräche und Dr.–Ing. Manfred Bischoff für das Wissen um und die Begeisterung an Schalentheorie, Elementtechnologie, Funktionalen und einigem mehr.

Meiner Frau Kerstin Dübner–Gee danke ich für ihre Liebe, die andauernde Unterstützung und den Rückhalt, den sie mir gewährt hat, meinem Sohn Leon Samuel für die Lektion, dass Spiel wichtiger ist als Arbeit.

Meinen lieben Eltern, Monika und Dr.–Ing. Colin Gee, danke ich für ihre lange und andauernde Unterstützung und das Aufzeigen und Eröffnen aller Möglichkeiten und Chancen.

Volker Bähr danke ich für die sorgfältige Durchsicht des Manuskripts und die hilfreichen Verbesserungsvorschläge.

Inhalt

1	Einführung	1
1.1	Motivation und Ziele der Arbeit	1
1.2	Übersicht	3
2	Kontinuumsmechanik und Schalenmodell	6
2.1	Kontinuumsmechanische Grundlagen	6
2.2	7-Parameter-Schalenformulierung und räumliche Diskretisierung	11
2.3	Zeitdiskretisierung	17
2.4	Linearisierung und effektive dynamische Strukturgleichung	19
3	Softwareentwurf	21
3.1	Einführung	21
3.2	Kommunikationsmodelle für paralleles Rechnen	22
3.3	Datenstrukturen für parallele Simulation von Mehrfeldproblemen	24
3.4	Verteilte dünnbesetzte Matrizen	35
4	Parallele Algorithmen und Vorkonditionierung	40
4.1	Einführung	40
4.2	Paralleles Matrix-Vektor-Produkt	41
4.3	Parallele Lösung linearer Gleichungssysteme	44
4.4	Basismethoden zur Vorkonditionierung	53
4.5	Überlappende Gebietszerlegungsmethoden als Vorkonditionierung	60
5	Skalierter-Direktor-Ansatz für die 7-Parameter-Schalenformulierung ..	73
5.1	Die Konditionierung bei dünnwandigen Strukturen	73
5.2	Skalierter-Direktor-Ansatz (SDC)	78
5.3	Auswirkungen von SDC auf die Konditionierung	84
5.4	Einfluss des SDC-Ansatzes in der Dynamik	87
5.5	Beispiele	90
6	Multigrid-Vorkonditionierung	95
6.1	Einführung	96
6.2	Multilevel-Schwarzsche-Gebietszerlegungsmethoden	101
6.3	Geometrischer Multigrid bei unstrukturierten Diskretisierungen	106
6.4	Aggregations-Multigrid	109
6.5	Kombinierte SDC- / AMG-Vorkonditionierung	134

6.6	Beispiele	136
6.7	Ausblick	143
7	Schalenkontakt bei großen Deformationen	147
7.1	Kontaktrandbedingungen	147
7.2	Schwache Form der Kontaktrandbedingungen	156
7.3	Regularisierung der Kontaktrandbedingungen	158
7.4	Linearisierung	161
7.5	Räumliche Diskretisierung des Kontakts	163
7.6	Zeitliche Diskretisierung der Reibung	166
7.7	Matrizenformulierung	168
7.8	Algorithmische Augmented–Lagrange–Regularisierung	170
7.9	Kontaktsuche	173
7.10	Beispiele	180
8	Zusammenfassung und Ausblick	185
	Literatur	189
	Anhang	195
A1	Direkte Lösungsverfahren (LU–Faktorisierung)	195
A2	Einige iterative Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme	196
A3	Basisvorkonditionierungsverfahren	199
A4	Kontakt für die 7–Parameter–Schalenformulierung	205

Abkürzungen und Bezeichnungen

In der vorliegenden Arbeit werden nach Möglichkeit deutsche Bezeichnungen verwendet. In den Fällen, in denen englische Begriffe als feststehende Bezeichnungen angesehen werden können, für die keine passende deutsche Entsprechung gegeben werden kann, wird der englische Begriff eingeführt und anschließend ausschließlich verwendet.

Weiter bezeichnen fettgedruckte kleine Buchstaben Vektoren, fettgedruckte Großbuchstaben bezeichnen Tensoren zweiter und höherer Stufe sowie Matrizen. Eine Verwechslung von Matrizen und Tensoren sollte in dem jeweiligen Kontext ausgeschlossen sein.

Auf folgende Abkürzungen und Bezeichnungen wird mehrfach zurückgegriffen:

Abkürzungen

ALE	Arbitrary Lagrangean Eulerian
ANS	Assumed Natural Strain
ASM	Additive–Schwarzsche–Gebietszerlegung (Additive Schwarz Method)
DCSR	Distributed Compressed Sparse Row
DOLL	Distributed Orthogonal Linked List
EAS	Enhanced Assumed Strain
LGS	Lineares Gleichungssystem
MG	Multigrid
MPI	Message Passing Interface
MSM	Multiplikative–Schwarzsche–Gebietszerlegung (Multiplicative Schwarz Method)
OpenMP	Open Multi Processing
SAMG	Smoothed Aggregation Multigrid
SDC	Skaliertes–Direktor–Vorkonditionierung (Scaled Director Conditioning)

Bezeichnungen

a	Skalar, verschiedene Verwendungen
α_m, α_f	Zeitintegrationsparameter der Generalized- α Zeitintegration
α_{ij}	in θ^3 konstante Anteile der Komponenten von \mathbf{E}
\mathbf{a}	Vektor der elementweise definierten Koeffizienten der Ansatzfunktionen von $\tilde{\mathbf{E}}$
$\mathcal{A}_{i^{(l+1)}}^{(l)}$	Aggregat aus Knoten des Level l , repräsentiert durch Knoten $i^{(l+1)}$ auf Level $l + 1$
\mathbf{a}	Metriktensor (Einheitstensor) der Schalenmittelfläche
$\mathbf{a}_i, \mathbf{a}^i$	ko- und kontravariante Basisvektoren der Schalenmittelfläche
$\mathbf{a}_3 = \mathbf{g}_3$	Direktor
\mathbf{a}^P	Wertevektor des DCSR–Speicherformats
\mathbf{A}	dünnbesetzte Matrix

A^{Ω_i}	mit Teilgebiet Ω_i assoziierter Teil der dünnbesetzten Systemmatrix A
$A_{(l)}$	Systemmatrix auf Level l
$A_{(l)}^0$	semipositiv definite Systemmatrix A des ungelagerten Körpers auf Level l
β	Skalar, verschiedene Verwendungen
β_{ij}	in θ^3 lineare Anteile der Komponenten von E
b_A	Bandbreite der Matrix A
$b_i^{(l)}$	Starrkörpermode i auf Level l
b	Volumenkraftvektor pro Masseneinheit
$B^{(l)}$	Repräsentation der Starrkörpermoden von $\Omega_{(l)}$ und Kernel von $A_{(l)}^0$ auf Level l
B	B–Operator der Schalenformulierung
B^{Ω_i}	Innerlevel–Teilgebietskorrektur des Teilgebiets Ω_i
c	Skalierungsfaktor der SDC–Vorkonditionierung
\underline{C}	vierstufiger Materialtensor
d	Vektor der Knotenverschiebungen und Lösungsvektor eines Gleichungssystems
d^0	Startschätzung einer Iteration zur Bestimmung von d
d^k	fehlerbehaftete Iterierte im Iterationsschritt k
\dot{d}	Vektor der Knotengeschwindigkeiten
\ddot{d}	Vektor der Knotenbeschleunigungen
d_D	Vektor vorgegebener Knotenverschiebungen auf einem Dirichlet–Rand Γ_D
\tilde{D}	Verzerrungsmatrix (EAS–Methode)
D	mittelflächenbezogener Materialtensor der Schalentheorie, im Kontext der Lösung linearer Gleichungssysteme eine Diagonalmatrix
ϵ_N	Penalty–Parameter des Normalkontakts
ϵ_T	Penalty–Parameter des Reibkontakts
e	Fehlervektor
e^k	Fehlervektor in einem Iterationsschritt k
E	E–Modul
E	Green–Lagrange–Verzerrungstensor
E^u	verschiebungsabhängiger Green–Lagrangescher Verzerrungstensor
\tilde{E}	Tensor der zusätzlichen Verzerrungen beim modifizierten Prinzip von Hu–Washizu
F	materieller Deformationsgradient
f	Flächen– oder Einzellast, die Einheiten sind im Kontext angegeben
f	Vektor der rechten Seite eines Gleichungssystems
f^{dyn}	Massenkräfte
f^{int}	innere Kräfte
f^{ext}	äußere Kräfte
f^c	Kontaktkräfte

γ	Skalar, verschiedene Verwendungen
Γ_c	Gebietsrand eines Körpers mit Kontakt–Randbedingung
Γ_D	Gebietsrand eines Körpers mit Dirichlet–Randbedingung
Γ_N	Gebietsrand eines Körpers mit Neumann–Randbedingung
Γ_i	Rand von Teilgebiet Ω_i mit Dirichlet–Randbedingung aus Schwarzscher Gebietszerlegung
g	Klaffung zwischen zwei Körpern
\mathbf{g}	Metriktensor (Einheitstensor)
$\mathbf{g}_i, \mathbf{g}^i$	ko– und kontravariante Basisvektoren
$\mathbf{g}_3 = \mathbf{a}_3$	Direktor
\mathbf{G}	Iterationsmatrix
h	Maß für Elementabmessungen beziehungsweise Knotenabstand in einer Diskretisierung
i	Skalar, verschiedene Verwendungen
\mathbf{i}_i	orthonormale, globale Basisvektoren
\mathbf{ia}^P	Indexvektor des DCSR–Speicherformats
\mathbf{ir}	Zeigervektor des DOLL–Speicherformats
\mathbf{I}	Einheitsmatrix
j	Skalar, verschiedene Verwendungen
\mathbf{ja}^P	Indexvektor des DCSR–Speicherformats
\mathbf{jc}	Zeigervektor des DOLL–Speicherformats
k	Skalar, verschiedene Verwendungen
K	Nummer eines an einer parallelen Rechnung beteiligten Prozesses
\mathbf{K}_T^u	von den Verschiebungen abhängige tangentielle Steifigkeitsmatrix
$\hat{\mathbf{K}}_T$	tangentielle Steifigkeitsmatrix (EAS–Methode)
$\hat{\mathbf{K}}_T^{eff}$	effektive, dynamische Steifigkeitsmatrix
λ	Eigenwert
λ_L, μ_L	Lamé–Konstanten
λ_N, λ_T	Lagrange–Multiplikatoren der Normal– und Tangentialkontaktkraft
L	Anzahl der Groblevel im Rahmen von Multilevel–Gebietszerlegungsmethoden
\mathbf{L}	Kopplungsmatrix (EAS–Methode) in Kap. 2, untere Dreieckmatrix sonst
μ_L, λ_L	Lamé–Konstanten
$\hat{\mu}$	Schalenshifter
μ	Reibungskoeffizient
M_m	Ansatzfunktion für zusätzliche Verzerrungen in einem Element (EAS–Methode)
\mathbf{M}	Massenmatrix
\mathbf{M}^{-1}	Vorkonditionierungsmatrix

$(\mathbf{M}^{\Omega_{ii}})^{-1}$	Teilgebietsvorkonditionierung des Teilgebiets Ω_i
ν	Querdehnzahl
\mathbf{v}	auswärtsgerichtete Normale im Projektionspunkt auf der Masteroberfläche
n	Skalar, verschiedene Verwendungen
N	Anzahl der Unbekannten eines linearen Gleichungssystems
N^{Ω_i}	Anzahl der Unbekannten eines linearen Gleichungssystems, die mit einem diskretisierten Teilgebiet Ω_i assoziiert sind
N^{nz}	Anzahl der von Null verschiedenen Werte einer Koeffizientenmatrix eines linearen Gleichungssystems
N^P	Anzahl an einer parallelen Simulation beteiligter Prozesse und Anzahl Teilgebiete Ω_i von Ω
N_n	Ansatzfunktion von Knoten n
$N_{nd}^{(l)}$	Anzahl Knoten der Diskretisierung $\Omega_{(l)}$ auf Level l
$N_{nd}^{\mathcal{A}}$	Anzahl Knoten in einem Aggregat $\mathcal{A}_{i(\omega)}$
N_i^{dof}	Anzahl Freiheitsgrade am Knoten i
N_{nd}^{el}	Anzahl Knoten an einem Element
N_a^{el}	Anzahl zusätzlicher Verzerrungsfreiheitsgrade in einem Element (EAS–Methode)
ω	Skalar, verschiedene Verwendungen
Ω	(diskretisierter) materieller Körper beziehungsweise Gebiet
Ω_i	Teilgebiet i im Rahmen überlappender Gebietszerlegung
$\Omega_{(l)}$	Gebiet des Level l im Rahmen von Multilevel–Gebietszerlegungsmethoden
ϕ	Winkel, verschiedene Verwendungen
ϕ	Eigenvektor
Φ	Coulombsches Reibgesetz
Π_{HW}^{mod}	potentielle Energie beim modifizierten Prinzip von Hu–Washizu
$\delta\Pi_c$	virtuelle Arbeit der Kontaktkräfte
p	Skalar, verschiedene Verwendungen
P	Nummer eines an einer parallelen Rechnung beteiligten Prozesses
\mathbf{P}	Erster Piola–Kirchhoff Spannungstensor (PK1)
\mathbf{P}^{Ω_i}	Innerlevel–Prolongationsmatrix des Teilgebiets Ω_i
$\hat{\mathbf{P}}_{(l)}^{(l+1)}$	vorläufige Interlevel–Prolongationsmatrix von größerem Level $l + 1$ auf feineres Level l
$\mathbf{P}_{(l)}^{(l+1)}$	Interlevel–Prolongationsmatrix von größerem Level $l + 1$ auf feineres Level l
$\tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)}$	zusammengesetzte Interlevel–Prolongationsmatrix von Level $l > 0$ auf Level 0
\mathbf{p}^k	Suchrichtung des CG–Verfahrens in einem Iterationsschritt k
$\mathbf{Q}^{(l)}$	orthonormale Basis von $\mathbf{B}^{(l)}$ aus Gram–Schmidt–Orthogonalisierung
ϱ	Dichte

rbm	Anzahl Starrkörpermoden einer Struktur unter Mißachtung der Dirichlet–Randbedingungen
r	Ortsvektor zu einem Punkt der Schalenmittelfläche
r^k	Residuumsvektor in einem Iterationsschritt k
R^{Ω_i}	Innerlevel–Restriktionsmatrix des Teilgebiets Ω_i
$R^{(l+1)}$	Interlevel–Restriktionsmatrix von feinerem Level l auf gröberes Level $l + 1$
$\tilde{R}^{(l)}$	zusammengesetzte Interlevel–Restriktionsmatrix von Level 0 auf Level $l > 0$
S	Zweiter Piola–Kirchhoff Spannungstensor
θ^i	krummliniges, konvektives Koordinatensystem
$\hat{\theta}$	Mittelflächenentsprechung des Projektionspunktes $\hat{\xi}$ im Koordinatensystem θ^i
Θ	Fallunterscheidungsmatrix des Schalenkontakts
τ_α, τ^α	konvektive ko– und kontravariante Basisvektoren im Koordinatensystem ξ^α der Schalenoberfläche im Projektionspunkt \hat{y}
τ	Metriktensor (Einheitstensor)
t	Schalendicke beziehungsweise Zeitvariable, in Abhängigkeit vom Kontext
T	Gesamtzeit der Zeitintegration
t_n	Zeit zum Zeitschritt n
t_N	Betrag der Normalkontaktkraft
Δt	Zeitinkrement
t	Spannungsvektor
t_T	Tangentialkontaktkraft (Reibkraft)
t_N	vorgeschriebener Spannungsvektor in einem Punkt auf einem Neumann–Rand Γ_N
ua^P	Indexvektor des DCSR–Speicherformats
u	Verschiebungsvektor eines Punktes
u_D	vorgegebene Verschiebung auf einem Dirichlet–Rand Γ_D
\ddot{u}	Beschleunigungsvektor eines Punktes
U	obere Dreieckmatrix
$U^{(l)}$	quadratische obere Dreieckmatrix aus Gram–Schmidt–Orthogonalisierung von $B^{(l)}$
v	Verschiebungsvektor eines Punktes der Schalenmittelfläche
v_T, \bar{v}_T	konvektive tangentielle Relativgeschwindigkeit zweier Körper in der Referenz– und Momentankonfiguration
W^{int}	Verzerrungsenergiedichtefunktion
w	Differenzverschiebung eines Punktes der Schalenoberseite zu deren Mittelfläche
ξ^α	krummliniges, konvektives Koordinatensystem der Schalenoberfläche
$\hat{\xi}$	konvektive Projektion eines Punktes x zum Zeitpunkt t eines Körpers auf einen anderen Körper im Koordinatensystem ξ^α der Schalenoberfläche
x	Ortsvektor zu einem Punkt des Schalenkörpers

- $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ konvektive Projektion eines Punktes \mathbf{x} zum Zeitpunkt t eines Körpers auf einen anderen Körper in der Referenzkonfiguration
- $\hat{\mathbf{y}}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t), t)$ konvektive Projektion eines Punktes \mathbf{x} zum Zeitpunkt t eines Körpers auf einen anderen Körper in der Momentankonfiguration
- \mathbf{z}^k vorkonditioniertes Residuum (Korrektur) im Iterationsschritt k

Weitere Bezeichnungen werden beim jeweiligen Auftreten erläutert.

Mathematische Notationen

- $c(\mathbf{A})$ spektrale Konditionszahl von \mathbf{A}
- $\frac{\partial a}{\partial b} = a_{,b}$ partielle Ableitung von a nach b
- $\text{LIN}(a)$ Linearisierung von a
- $\delta \mathbf{u}$ Variation von \mathbf{u}
- $\Delta \mathbf{u}$ Inkrement bezüglich \mathbf{u}
- δ_j^i Kronecker-Delta
- $\text{div}(\mathbf{A})$ Divergenz von \mathbf{A} bezogen auf die Referenzkonfiguration
- $H(\cdot)$ Heaviside-Funktion, liefert den Wert Eins bei positivem Operanden und ansonsten Null
- $\langle \cdot \rangle$ Macauley-Klammer, liefert den Wert des Operanden, wenn dieser positiv ist, und ansonsten Null
- $\| \cdot \|_p$ p -Norm
- $\| \cdot \|_\infty$ ∞ -Norm
- $\| \cdot \|_A$ Energienorm bezüglich \mathbf{A}
- $o(n)$ Term der Ordnung n
- (\mathbf{p}, \mathbf{q}) inneres Produkt der Vektoren \mathbf{p} und \mathbf{q}
- \mathbf{A}_{i*} Zeile i von \mathbf{A}
- \mathbf{A}_{*j} Spalte j von \mathbf{A}
- \mathbb{R} Menge aller reellen Zahlen
- \mathbb{R}^+ Menge aller positiven reellen Zahlen
- \mathbb{R}_0^+ Menge aller nicht negativen reellen Zahlen
- $\rho(\mathbf{A})$ Spektralradius der Matrix \mathbf{A}
- $S(\mathbf{A})$ Belegung der dünnbesetzten Matrix \mathbf{A} mit von Null verschiedenen Werten

1 Einführung

1.1 Motivation und Ziele der Arbeit

Dünnwandige, flächige Körper, bei denen eine der drei räumlichen Ausdehnungen viel kleiner ist als die beiden anderen, sind ein in der Natur und in vielen Bereichen der Technik ausgesprochen häufig vorkommendes Konstruktionselement. So ist es nicht verwunderlich, dass die Bemühungen, das Tragverhalten von Schalenkonstruktionen zu analysieren und zu verstehen, schon vor Hunderten von Jahren einsetzen (Benvenuto (1991)).

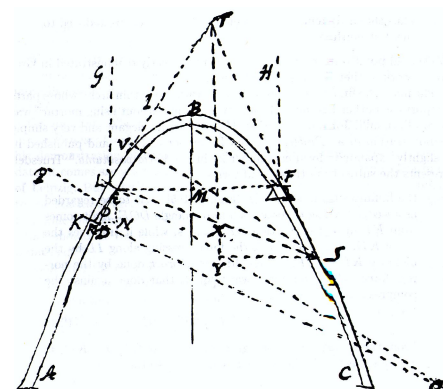


Abb. 1.1: Schalen in Natur und Technik

Aufgrund ihres hohen Verhältnisses von Steifigkeit zu Eigengewicht können dünnwandige Schalenstrukturen außergewöhnliche Tragwerkseigenschaften aufweisen. Auf der anderen Seite zeigen sie jedoch wiederum auch eine große Empfindlichkeit gegenüber Imperfektionen der Geometrie oder ungeeigneter Arten von Belastung. Sie finden in einer Vielzahl von Disziplinen wie dem Maschinenbau, dem Bauwesen, der Luft- und Raumfahrttechnik oder der Medizintechnik ihre Anwendung. Entsprechend groß ist auch heute das Interesse an Berechnungsmethoden zur Erforschung des Trag- und Versagensverhaltens, zur Dimensionierung und Optimierung und zur Unterstützung des Entwurfs geeigneter Schalenkonstruktionen.

Spricht man von Berechnungsmethoden, so impliziert dies heutzutage automatisch den Einsatz von Simulationsmodellen und Computern sowie die Entwicklung und Anwendung geeigneter numerischer Verfahren und Algorithmen wie beispielsweise der Methode der Finiten Elemente.

Dabei treiben die Entwicklungen aus dem Bereich der mathematischen Modellierung physikalischer und technischer Fragestellungen einerseits und dem Bereich der Informatik und Computertechnik andererseits sich gegenseitig auf erfrischende Weise an. Die Verfügbarkeit immer leistungsfähigerer Computer weckt den Wunsch nach der Berechnung immer komplexerer Fragestellungen bei gleichzeitiger Erhöhung der Approximationsqualität. Beispiele hierfür sind Mehrfeldsimulationen wie beispielsweise die Fluid–Struktur–Interaktion, Optimierungsprobleme oder die Berücksichtigung geometrisch oder materiell nichtlinearer Effekte. Diese Anwendungen wiederum sind auch immer Triebfeder für die Konstruktion noch leistungsfähigerer Computer, zum Beispiel von Parallelrechnern mit einigen bis zu sehr vielen Prozessoren.

Im Bereich der Schalenmodellierung erlauben Modelle, deren Kinematik eine Dickenänderung des Schalenkörpers beinhaltet, eine effiziente näherungsweise Berücksichtigung dreidimensionaler Effekte und die Anwendung unmodifizierter dreidimensionaler Stoffgesetze. Die Modellierung von Schalen mit anisotropem, nichtlinearem Materialverhalten beispielsweise von bewehrtem Beton oder faserverstärktem Kunststoff, die Betrachtung von Delamination von geschichteten Strukturen oder die Verwendung solcher Schalenmodelle in der oberflächengekoppelten Fluid–Struktur–Interaktion sind Forschungsbereiche, die sich die Vorteile einer solchen dreidimensionalen Schalenformulierung zu Nutze machen. Für die auch dieser Arbeit zugrundeliegende 7–Parameter Schalenformulierung, die auf Büchter und Ramm (1992) und Büchter et al. (1994) zurückgeht, sind solche Anwendungen (ohne Anspruch auf Vollständigkeit) in Braun (1995), Haufe (2001), Hörmann (2002) und Mok (2001) beschrieben.

Für komplexe Simulationen mit feinen Diskretisierungen und entsprechend hohem Rechenaufwand ist der Einsatz effizienter Lösungsstrategien unter Verwendung von Parallelrechnern unvermeidlich. In dieser Arbeit wird hierzu ein Softwarekonzept auf der Basis von Gebietszerlegungsmethoden vorgeschlagen, das die benötigte Flexibilität aufweist, um Anwendungen wie beispielsweise dreidimensionale Fluid–Struktur–Interaktion einfach umzusetzen, das jedoch auch eine hohe Lösungsgeschwindigkeit durch Lösungsstrategien bietet, die speziell für eine parallele Bearbeitung durch mehrere Prozesse geeignet sind.

Ein Hauptaugenmerk gilt dabei der wiederholten parallelen Lösung großer linearer Gleichungssysteme, wie sie aus der Diskretisierung von Schalen mit Finiten Elementen auf der Basis der erwähnten Schalenformulierung resultieren. Die Charakteristik dieser Gleichungssysteme ist geprägt von den großen Steifigkeitsunterschieden zwischen den Biege–, Membran, Querschub– und Dickenänderungsanteilen an einer Deformation. Dies führt im Falle sehr schlanker Strukturen zu einer ausgesprochen schlechten Konditionierung der resultierenden Gleichungssysteme,

was deren Lösung mit für die Parallelisierung gut geeigneten iterativen Lösungsmethoden erschwert. Nach einer detaillierten Analyse der Gründe für diese schlechte Konditionierung werden daher hier Lösungsansätze angeboten, die diese schlechte Konditionierung verbessern beziehungsweise eine iterative Lösung effizient möglich machen. Dabei werden Kenntnisse über die dem Gleichungssystem zugrundeliegende Physik (im speziellen die Eigenschaft der Schlankheit der Körper) mit Wissen um die verwendeten Diskretisierungs- und Parametrisierungsstrategien und aktuellste Methoden der Vorkonditionierung von Gleichungssystemen auf der Basis von algebraischen Mehrgittermethoden miteinander kombiniert. Die Problematik, die sich dabei speziell aus der Parallelität und der zu ihrer Realisierung verwendeten Gebietszerlegung ergibt, wird dafür in einem gesonderten Kapitel diskutiert.

Ein weiterer hier betrachteter Punkt ist die Behandlung von Kontaktphänomenen, wie sie bei großen Deformationen dünnwandiger Körper auftreten können. Es wird eine Kontaktdiskretisierung für die dreidimensionale Schalenformulierung unter Berücksichtigung von Reibungseffekten und großen Deformationen vorgestellt und in den Rahmen einer impliziten Zeitintegration eingebettet. Der verwendete kontinuumsmechanische Kontaktansatz folgt dabei den Arbeiten von Laursen (1992) und (2002). Für die Kontaktformulierung selbst als auch für die parallelen Kontaktsuchalgorithmen resultieren aus der Schlankheit der Strukturen wiederum besondere zusätzliche Anforderungen aber auch Vorteile, die hier diskutiert werden. Beispielsweise wird gezeigt, dass eine *mittelflächenorientierte* Beschreibung schlanker Körper, wie sie von der verwendeten dreidimensionalen Schalenformulierung vorgenommen wird, die Formulierung der Kontaktrandbedingungen für die *Schalenoberflächen* sehr gut unterstützt und darüberhinaus in den Suchalgorithmen zu erheblichen Rechenzeiteinsparungen genutzt werden kann.

1.2 Übersicht

Im folgenden wird eine kapitelweise Übersicht über den Aufbau dieser Arbeit gegeben.

In *Kapitel 2* wird in Kürze auf die kontinuumsmechanischen Grundlagen, auf das verwendete Schalenmodell sowie auf die zum Einsatz kommende Zeitintegration eingegangen. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Inhalte, die zum Verständnis der vorliegenden Arbeit nötig sind, Verweise auf vorausgehende und weiterführende Literatur werden gegeben.

Kapitel 3 beschreibt das im Rahmen dieser Arbeit entstandene Softwarekonzept und stellt die zur Umsetzung von Mehrfeldproblemen nötigen geometrischen Datenstrukturen und Datentopologien vor. Die Modellierung von Mehrfeldproblemen selbst ist dabei nicht Gegenstand dieser Arbeit. Die hier betrachtete Schalenformulierung und das Softwarekonzept finden jedoch Anwendung im Rahmen von Fluid–Struktur–Interaktionsproblemen (Ramm und Wall (2003), Mok

(2001)). Einige Aspekte des Konzepts werden herausgegriffen und vorgestellt. Einführende Worte zu parallelen Programmiermodellen, die Beschreibung von verteilten und dynamischen Speicherformaten für große und dünnbesetzte Matrizen und Vektoren sowie die Realisierung der Parallelität auf der Basis von Daten- und Gebietszerlegung werden gegeben.

Parallele Algorithmen werden in *Kapitel 4* behandelt. Nachdem die Problematik der Kommunikation beim parallelen Rechnen anhand des einfachen Beispiels einer verteilten Matrix-Vektor-Multiplikation eingeführt wurde, werden parallele direkte und iterative Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme kurz genannt. Danach wird ein Vergleich von Vorkonditionierungsmethoden für Schalenstrukturen angestellt, die zusammen mit überlappenden Gebietszerlegungsmethoden im Rahmen der Multilevelvorkonditionierung in Kap. 6 verwendet werden.

Kapitel 5 beschäftigt sich mit den Ursachen schlechter Konditionierung von Gleichungssystemen der verwendeten dreidimensionalen Schalenformulierung. Es wird gezeigt, dass diese schlechte Konditionierung zum Teil auf die Wahl der Parametrisierung der Schalenrotationen und Schalendickenänderung zurückzuführen ist. Durch diese Parametrisierung mittels Mittelflächen- und Differenzverschiebungen, die ansonsten erhebliche Vorteile birgt, entsteht eine besondere Abhängigkeit der Konditionierung von der Schlankheit der Struktur, wie sie bei 'klassischen' Schalenformulierungen mit Rotationsfreiheitsgraden und ohne Berücksichtigung der Dickenänderung nicht auftritt. Es wird eine Skalierung der Schalendicke vorgestellt, die diese Abhängigkeit beseitigt und die Konditionierung der resultierenden Gleichungssysteme erheblich verbessert. Dabei wird Wert darauf gelegt, dass diese Skalierung neutraler Natur ist, sich also auch im Falle geometrischer und materieller Nichtlinearität, hybrider Elementformulierung und Dynamik nicht auf die erzielten Ergebnisse auswirkt. Dieser sogenannte *Skalierter-Direktor-Ansatz* (scaled director conditioning), der direkt in die Schalenformulierung eingebracht wird, kann daher als reine Vorkonditionierung betrachtet werden. Anhand von Beispielen werden die Auswirkungen auf das Lösungsverhalten iterativer Gleichungslöser diskutiert.

Da die in Kap. 4 und 5 vorgestellten Vorkonditionierungsstrategien ihrer Natur nach nicht in der Lage sind, *langwellige* Anteile der Lösung der Gleichungssysteme effizient zu ermitteln, werden sie in *Kapitel 6* mit einer algebraischen Multilevel-Gebietszerlegungsvorkonditionierung kombiniert. Das aus der Literatur entnommene Verfahren des sogenannten Aggregations-Multigrid ist speziell dafür entworfen, die Ermittlung langwelliger Lösungsanteile effizient zu beschleunigen. Anders als klassische geometrische Multilevel-Methoden, kommt das Verfahren mit dem linearen Gleichungssystem selbst und einigen zusätzlichen Informationen der bestehenden Diskretisierung und der zugrundeliegenden Schalenmechanik aus. Es benötigt daher keine Hierarchie zusätzlicher unterschiedlich grober Diskretisierungen des Problems. Die Methode des Aggregations-Multigrid wird für die dreidimensionale Schalenformulierung adaptiert sowie eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Variante des Aggregations-Multigrid vorgestellt. Anhand

von Beispielen wird die lösungsbeschleunigende Wirkung demonstriert, sowie die Kombinierbarkeit mit dem Skalierungsansatz aus Kap. 5 gezeigt.

Kapitel 7 hat eine Kontaktformulierung für die dreidimensionale Schalenformulierung zum Inhalt. Nachdem die kontinuumsmechanischen kinematischen und statischen Kontaktbedingungen für große Deformationen gegeben sind, wird auf die Regularisierung der Reibkontaktungleichheitsnebenbedingungen mittels sogenannter Augmented–Lagrange–Multiplikatoren eingegangen. Diese ermöglicht die Erfüllung der Kontaktbedingungen mit hoher Genauigkeit, was im Rahmen des Kontakts dünnwandiger Körper von besonderer Bedeutung ist.

Es erfolgt die Linearisierung der dieserart regularisierten Kontaktgleichungen, die Diskretisierung des Reibkontakts für dreidimensionale, bilineare Schalenelemente sowie die Einbettung in den Kontext einer impliziten Zeitintegration. Anschließend wird auf die Kontaktsuchalgorithmen eingegangen, die hier speziell für eine Anwendung bei schlanken Strukturen entworfen wurden. An Beispielen wird Kontakt und Selbstkontakt schlanker Körper bei großen Deformationen gezeigt.

Die Arbeit schließt in *Kapitel 8* mit einigen abschließenden Bemerkungen und einem Ausblick auf künftige Forschungsmöglichkeiten, sofern dieser nicht schon in den einzelnen Kapiteln gegeben wurde. Im *Anhang* finden sich Ausführungen zu den Lösungs– und Vorkonditionierungsmethoden sowie zum Kontakt, deren Kenntnis zum vertieften Verständnis oder Anwendung der Inhalte dieser Arbeit nötig ist.

2 Kontinuumsmechanik und Schalenmodell

Im Rahmen dieses Kapitels wird eine kurze Einführung in die Kontinuumsmechanik nur in so weit gegeben, wie sie als Bereitstellung der Grundlagen für die weiteren Kapitel sowie als Einführung der Bezeichnungen benötigt wird. Weiter wird die in dieser Arbeit fast ausschließlich verwendete Schalenformulierung und deren Umsetzung in eine Finite Element-Formulierung vorgestellt, sowie die dynamischen Grundlagen für eine nichtlineare Schalentheorie unter Verwendung eines impliziten Zeitintegrationsansatzes gegeben.

Die Ausführungen sind sicherlich zu knapp gehalten, um einen umfassenden Einblick in die Schalenformulierung als auch in die Strukturmechanik zu gewähren. Darum wird an jeweils geeigneter Stelle auf weiterführende und dieser Arbeit vorausgegangene Literatur verwiesen.

2.1 Kontinuumsmechanische Grundlagen

2.1.1 Differentialgeometrie

Um den Schalenkörper im dreidimensionalen Euklidischen Raum beschreiben zu können, wird ein krummliniges, konvекtives Koordinatensystem θ^i eingeführt, das als fest mit dem materiellen Körper verbunden gedacht wird (Abb. 2.1). Durch die Einführung zweier Konfigurationen ist es möglich, die Bewegung eines materiellen Punktes und die (große) Deformation des Körpers in diesem krummlinigen Koordinatensystem eindeutig zu beschreiben.

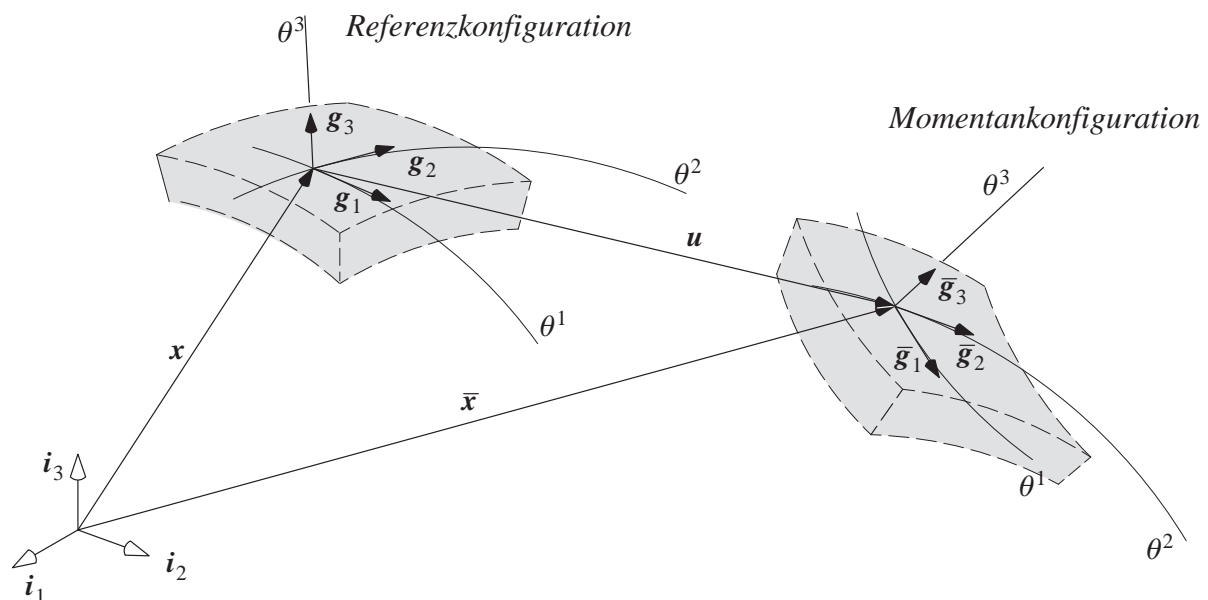


Abb. 2.1: Geometrie und Kinematik in krummlinigen Koordinaten

In der *Referenzkonfiguration*, die hier gleichzeitig die undeformierte Konfiguration darstellen soll, ist ein Materiepunkt durch seinen Ortsvektor $\mathbf{x}(\theta^1, \theta^2, \theta^3)$ beschrieben. In der *Momentan-*

konfiguration nimmt dieser Punkt die Lage $\bar{\mathbf{x}}(\theta^1, \theta^2, \theta^3)$ ein. Im Folgenden werden Größen, die sich auf die Momentankonfiguration beziehen, mit Querstrichen gekennzeichnet.

Es gilt weiter in diesem Kapitel 2 die Summationskonvention über gleiche Indizes. Lateinische Indizes nehmen dabei Werte von 1 bis 3 an, griechische Indizes die Werte 1 und 2.

Die Basisvektoren des krummlinigen Koordinatensystems θ^i der Referenz- und Momentankonfiguration lauten dann:

$$\mathbf{g}_i = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \theta^i}, \quad \mathbf{g}^i = \frac{\partial \theta^i}{\partial \mathbf{x}}, \quad (2.1)$$

$$\bar{\mathbf{g}}_i = \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \theta^i}, \quad \bar{\mathbf{g}}^i = \frac{\partial \theta^i}{\partial \bar{\mathbf{x}}}, \quad (2.2)$$

mit

$$\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \mathbf{u}. \quad (2.3)$$

Der zugehörige Einheitstensor (auch Metriktensor oder Metrik genannt) im Koordinatensystem θ^i ist in seiner ko- und kontravarianten Darstellung:

$$\mathbf{g} = g_{ij} \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j = g^{ij} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j, \quad g_{ij} = \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j, \quad g^{ij} = \mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}^j. \quad (2.4)$$

Die Metrik $\bar{\mathbf{g}}$ in der Momentankonfiguration ergibt sich hierzu analog aus den Basisvektoren $\bar{\mathbf{g}}_i$. Weil die ko- und kontravarianten Basisvektoren zueinander senkrecht stehen

$$\mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}_j = \delta_j^i \quad (2.5)$$

ergibt sich die für die Auswertung von Energieausdrücken wichtige Unabhängigkeit des Skalarproduktes zweier Tensoren \mathbf{E}, \mathbf{S} von der Metrik:

$$\mathbf{E} : \mathbf{S} = E_{ij} S^{ij}, \quad \mathbf{E} = E_{ij} \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j, \quad \mathbf{S} = S^{ij} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j. \quad (2.6)$$

Mit den Ortsvektoren der materiellen Punkte in zwei Konfigurationen und den Basisvektoren der krummlinigen Koordinatensysteme in beiden Konfigurationen sind alle Größen gegeben, die zu einer Beschreibung der Deformation und Bewegung des Körpers benötigt werden (Basar und Krätzig (1985)).

2.1.2 Kinematik und verwendete Verzerrungsmaße

Der *materielle Deformationsgradient* \mathbf{F} ist als lineare Abbildung eines Linienelementes der Referenzkonfiguration auf das entsprechende Linienelement in der Momentankonfiguration definiert. Dies ist gleichbedeutend mit einer Abbildung der im vorangegangenen Kapitel eingeführten Referenzbasisvektoren \mathbf{g}_i auf die Basisvektoren $\bar{\mathbf{g}}_i$ der Momentankonfiguration:

$$\bar{\mathbf{g}}_i = \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \theta^i} = \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \theta^i} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{g}_i. \quad (2.7)$$

\mathbf{F} ist ein unsymmetrischer Tensor zweiter Stufe

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}} = \bar{\mathbf{g}}_i \otimes \mathbf{g}^i \quad , \quad \mathbf{F}^T = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \bar{\mathbf{x}}} = \mathbf{g}^i \otimes \bar{\mathbf{g}}_i \neq \mathbf{F} \quad , \quad (2.8)$$

der den gesamten Bewegungsvorgang beschreibt und aufgrund der in der Bewegung enthaltenen Starrkörperanteile nicht als Verzerrungsmaß herangezogen werden kann. Es wird daher als weiteres Verzerrungsmaß die *Green–Lagrange–Verzerrungen* eingeführt:

$$\mathbf{E} = E_{ij} \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{g}) = \frac{1}{2} (\bar{g}_{ij} - g_{ij}) \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j \quad . \quad (2.9)$$

Der objektive Green–Lagrange–Verzerrungstensor ist symmetrisch und als Verzerrungsmaß in der Beschreibung großer Deformationen geeignet.

Gl. (2.9) stellt die kinematische Feldgleichung der Elastodynamik dar. Sie ist eine der drei Gebietsgleichungen, die zusammen mit den Rand– und Anfangsbedingungen das Anfangsrandwertproblem der Elastodynamik beschreiben. Für eine ausführlichere Betrachtung dieses und weiterer Verzerrungsmaße sei auf Mang und Hofstetter (2000) und Holzapfel (2000) verwiesen.

2.1.3 Bewegungsgleichung und Spannungsmaße

Über den Impulserhaltungssatz lässt sich die *lokale Impulsbilanz* oder auch *Erste Cauchysche Bewegungsgleichung* angeben. Sie stellt die lokale, punktweise Form des dynamischen Gleichgewichts des Körpers dar und ist die zweite Gebietsgleichung der Elastodynamik:

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{b} \quad \text{in} \quad \Omega \times [0, T] \quad . \quad (2.10)$$

Hierin ist ρ die Dichte des Körpers in der undeformierten Referenzkonfiguration, \mathbf{b} der Volumenkräftevektor pro Masseneinheit und \mathbf{P} der (unsymmetrische) *Erste Piola–Kirchhoff–Spannungstensor* (PK1)

$$\mathbf{P} = P^{ij} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j \quad , \quad (2.11)$$

der die aktuelle Kraft auf ein Flächenelement der Referenzkonfiguration bezieht.

Die aus der Unsymmetrie von \mathbf{P} resultierenden Nachteile bei einer numerischen Umsetzung werden durch die Definition des *Zweiten Piola–Kirchhoff–Spannungstensors* (PK2) \mathbf{S} vermieden. Dieser steht über den Deformationsgradienten mit dem PK1–Spannungstensor in Beziehung:

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{P} = S^{ij} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j \quad ; \quad \mathbf{P} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{S} \quad . \quad (2.12)$$

Der Zweite Piola–Kirchhoff–Spannungstensor bezieht sowohl die Kraft als auch die Fläche auf die Referenzkonfiguration und ist das zum Green–Lagrange Verzerrungstensor \mathbf{E} energetisch konjugierte Spannungsmaß. Mit Gl. (2.12) lautet die Bewegungsgleichung Gl. (2.10) dann

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \operatorname{div} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{S}) + \rho \mathbf{b} \quad \text{in} \quad \Omega \times [0, T] \quad , \quad (2.13)$$

womit die zweite Feldgleichung des Anfangsrandwertproblems gegeben ist.

2.1.4 Materialgesetz

Das Materialgesetz setzt die kinematischen Größen mit den Spannungsgrößen in Beziehung. Bei der hier gewählten Betrachtungsweise, bei der sich alle Größen auf die undeformierte Referenzkonfiguration beziehen, sind dies die Green–Lagrange Verzerrungen \mathbf{E} und die Zweiten Piola–Kirchhoff Spannungen \mathbf{S} .

Postuliert man die Existenz einer Verzerrungsenergiefunktion $W^{int}(\mathbf{E})$ mit Potentialcharakter (Holzapfel (2000)), so ergibt sich der Materialtensor, der hier mit $\underline{\mathbb{C}}$ bezeichnet wird, zu:

$$\underline{\mathbb{C}} = \frac{\partial^2 W^{int}(\mathbf{E})}{\partial \mathbf{E} \partial \mathbf{E}} . \quad (2.14)$$

Bei dem linearen *St. Venant–Kirchhoff–Materialgesetz* bildet $\underline{\mathbb{C}}$ einen linearen Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen und ist auf kleine Verzerrungen beschränkt:

$$\mathbf{S} = \underline{\mathbb{C}} : \mathbf{E} \quad , \quad \underline{\mathbb{C}} = \mathbb{C}^{ijkl} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j \otimes \mathbf{g}_k \otimes \mathbf{g}_l . \quad (2.15)$$

Unter Annahme isotropen Materialverhaltens und der Berücksichtigung der Symmetrie von \mathbf{E} und \mathbf{S} genügen die als Lamé–Konstanten bekannten zwei Materialparameter λ_L und μ_L zur Beschreibung des Materialverhaltens:

$$\mathbb{C}^{ijkl} = \lambda_L g^{ij} g^{kl} + \mu_L (g^{ik} g^{jl} + g^{il} g^{kj}) , \quad (2.16)$$

$$\lambda_L = \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad , \quad \mu_L = \frac{E}{2(1 + \nu)} .$$

E ist hierin der E–Modul und ν die Querdehn– oder Poissonzahl. Das Materialgesetz stellt die dritte der benötigten Feldgleichungen dar.

2.1.5 Anfangsrandwertproblem der Elastodynamik

Basierend auf den Feldgleichungen Gl. (2.3), (2.9), (2.13) und (2.15) kann nun zusammen mit den noch fehlenden Anfangs– und Randbedingungen die *starke* oder *lokale Form* des Anfangsrandwertproblems in Abb. 2.2 zusammengefasst werden. Es stellt ein System nichtlinearer, gekoppelter partieller hyperbolischer Differentialgleichungen mit den zugehörigen Randbedingungen dar. Die Randbedingungen auf dem Gebietsrand $\Gamma = \partial\Omega$ setzen sich zusammen aus den Dirichlet–Randbedingungen auf Γ_D mit vorgeschriebenen, unter Umständen zeitlich veränderlichen Verschiebungen \mathbf{u}_D und den Neumann–Randbedingungen auf Γ_N mit vorgeschriebenem Spannungsvektor \mathbf{t}_N .

Dabei gilt, dass auf einem Teilrand des Gebietes jeweils nur eine der Randbedingungen gegeben sein darf:

$$\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset . \quad (2.17)$$

Im Rahmen der in Kap. 7 vorgestellten Kontaktformulierung wird noch eine weitere Randbedingung Γ_c der Kontaktflächen von Ω eingeführt, die an dieser Stelle jedoch noch nicht berücksichtigt werden soll.

- *Dynamik – Erste Cauchy'sche Bewegungsgleichung*

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \operatorname{div}(\mathbf{F} \cdot \mathbf{S}) + \rho \mathbf{b} \quad \text{in } \Omega \times [0, T]$$

- *Kinematik – Green–Lagrange–Verzerrungen*

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{g}) = \frac{1}{2}(\bar{g}_{ij} - g_{ij}) \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j$$

- *Material – konstitutive Beziehung (hier exemplarisch St. Venant–Kirchhoff)*

$$\mathbf{S} = \underline{\mathbb{C}} : \mathbf{E}$$

- *Dirichlet–Randbedingung*

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D \quad \text{auf } \Gamma_D \times [0, T]$$

- *Neumann–Randbedingung*

$$\mathbf{t} = \mathbf{t}_N \quad \text{auf } \Gamma_N \times [0, T]$$

- *Anfangsbedingungen*

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \quad ; \quad \dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{u}}_0 \quad \text{in } \Omega \text{ bei } t = 0$$

Abb. 2.2: *Starke Form des Anfangsrandwertproblems*

2.1.6 Schwache Form

Die Lösung des Anfangsrandwertproblems Abb. 2.2 mit der Methode der Finiten Elemente erfordert eine Darstellung der Gleichungen im integralen Sinne.

Hier wird die schwache Form in aller Kürze mittels des *Prinzips der virtuellen Verschiebungen* gezeigt. Dieses Prinzip besagt, dass die bei einer gedachten (virtuellen) Verschiebung des Systems aus seiner Gleichgewichtslage heraus verrichtete Arbeit aller inneren und äußeren Kräfte gleich Null ist. Die virtuellen Verschiebungen entsprechen der Variation der Verschiebungen $\delta \mathbf{u}$, sind infinitesimal klein, erfüllen die Dirichlet–Randbedingungen und sind ansonsten jedoch beliebig. Mit ihnen und der aus ihnen abgeleiteten Variation der Verzerrungen $\delta \mathbf{E}$ werden die Bewegungsgleichung und die Neumann–Randbedingungen in integraler Form erfüllt:

$$\int_{\Omega} \rho \ddot{\mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} \, d\Omega + \int_{\Omega} \delta \mathbf{E} : \mathbf{S} \, d\Omega - \int_{\Gamma_N} \mathbf{t}_N \cdot \delta \mathbf{u} \, d\Gamma_N - \int_{\Omega} \rho \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} \, d\Omega = 0 \quad . \quad (2.18)$$

Die übrigen Feldgleichungen sowie die Dirichlet–Randbedingungen bleiben in ihrer starken, punktwisen Form gegeben.

Die in dieser Arbeit hauptsächlich verwendete Schalenformulierung basiert jedoch auf einer verallgemeinerung des obigen Prinzips. Dazu wird ein Mehrfeldfunktional verwendet, dass neben den Verschiebungen als freie Variablen noch von den Verschiebungen unabhängige Verzerrungen einführt.

2.2 7-Parameter-Schalenformulierung und räumliche Diskretisierung

In dieser Arbeit wird fast ausschließlich eine dreidimensionale Schalenformulierung verwendet, die auf Arbeiten von Büchter und Ramm (1992) und Büchter, Ramm und Roehl (1994) basiert und in Bischoff und Ramm (1997) und (2000) sowie Bischoff (1999) detailliert analysiert wird. Es wird daher hier in die Schalenformulierung nur in soweit eingeführt, als dies zum Verständnis der vorliegenden Arbeit notwendig ist.

Es handelt sich bei dieser sogenannten *7-Parameter-Schalenformulierung* um eine Formulierung auf der Basis einer Reissner-Mindlin Kinematik, die um die Dickenänderung der Schale erweitert wurde. Die entscheidende Eigenschaft dieser Formulierung ist, dass – im Gegensatz zu konventionellen Schalentheorien – durch die Berücksichtigung der Schalendickenänderung der vollständige dreidimensionale Verzerrungs- und Spannungszustand berücksichtigt wird und somit eine Verwendung unmodifizierter dreidimensionaler Stoffgesetze möglich ist.

Um eine für Biegung asymptotisch korrekte dreidimensionale Formulierung zu erhalten, muss im allgemeinen Fall einer von Null verschiedenen Querkontraktionszahl die Schalendickenverzerrung E_{33} in Schalendickenrichtung mindestens linear veränderlich sein. Dies kann durch die Wahl eines über die Dicke quadratischen Ansatzes für die Querverschiebung oder – wie hier – mit einem linearen Verschiebungsfeld und einer zusätzlichen, von den Verschiebungen unabhängigen linear verlaufenden Verzerrung \tilde{E}_{33} erreicht werden. Diese von den Verschiebungen unabhängige Verzerrungskomponente wird über ein Mehrfeldfunktional eingebracht. Dazu wird die erstmalig in Simo und Rifai (1990a) genannte *Enhanced Assumed Strain*–(EAS–) Methode verwendet, die auf einem modifizierten Funktional von Hu–Washizu basiert. Das Konzept wurde in der hier verwendeten Form von Büchter und Ramm (1992) auf nichtlineare Probleme erweitert und ist die Basis für diese im folgenden kurz zusammengefasste Schalenformulierung.

Die Deformation der Schalenormalen (Direktor) wird in dieser Formulierung über drei Differenzverschiebungen zwischen der Schalenormalen in der Referenz- und der Momentankonfiguration parametrisiert, was im Vergleich zu einer Parametrisierung mittels Rotationstensor und Rotationsfreiheitsgraden zu einer erheblichen Vereinfachung bei der Formulierung für endliche Rotationen, bei der Variation und Linearisierung sowie der Zeitableitung führt.

Diese Wahl der Parametrisierung führt jedoch zu einer sehr ungünstigen Abhängigkeit der Konditionierung der resultierenden Steifigkeits- und Massenmatrizen von der Schalendicke in einem Ausmaß, wie sie bei Rotationsformulierungen nicht gegeben ist (Simo et al. (1990b)). Diese Problematik wird in Kap. 5 eingehender studiert und eine Lösung dieses Problems geschildert.

2.2.1 Variationelle Basis – modifiziertes Prinzip von Hu–Washizu

Ausgangspunkt für die 7-Parameter-Schalenformulierung ist nun nicht das Prinzip der virtuellen Verschiebungen Gl. (2.18), sondern das sogenannte *modifizierte Funktional von Hu–Washizu*. Es bildet die Grundlage der EAS-Methode, wie sie erstmalig für lineare Probleme von

Simo und Rifai (1990a) eingeführt und von Büchter und Ramm (1992) und Büchter et al. (1994) für eine nichtlineare Schalenformulierung angewandt wurde.

Die freien Variablen des Funktionals sind die Verschiebungen \mathbf{u} sowie die von den Verschiebungen unabhängigen zusätzlichen Verzerrungen

$$\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{E}_{33} \mathbf{g}^3 \otimes \mathbf{g}^3 , \quad (2.19)$$

die zusammen mit den direkt von den Verschiebungen abhängigen Verzerrungen \mathbf{E}^u nun den Verzerrungstensor bilden:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^u + \tilde{\mathbf{E}} . \quad (2.20)$$

Für den Verlauf der Verschiebungen und zusätzlichen Verzerrungen in Schalendickenrichtung werden nun Annahmen getroffen, die als 'Semidiskretisierung' in Schalendickenrichtung bezeichnet werden können.

2.2.2 Semidiskretisierung in Dickenrichtung und kinematische Variablen

Zunächst werden die kovarianten Basisvektoren \mathbf{a}_i des krummlinigen Koordinatensystems auf der Schalenmittelfläche $\theta^3 = 0$ bestimmt (Abb. 2.3).

Diese ergeben sich aus den Richtungsableitungen der Ortsvektoren der Schalenmittelflächenpunkte in der Referenz- und Momentankonfiguration:

$$\mathbf{a}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta^\alpha} = \mathbf{r}_{,\alpha} , \quad \bar{\mathbf{a}}_\alpha = \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial \theta^\alpha} = \bar{\mathbf{r}}_{,\alpha} . \quad (2.21)$$

Der *Schalendirektor* oder kurz *Direktor* \mathbf{a}_3 steht in der Referenzkonfiguration senkrecht zur Schalenebene, zeigt von der Schalenmittel- zur Schalenoberfläche und hat somit die Länge der halben Schalendicke $t/2$:

$$\mathbf{a}_3 = \frac{t}{2} \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|} . \quad (2.22)$$

Die Punkte des Schalenkörpers können dann in ihrer jeweiligen Konfiguration durch die Ortsvektoren der Schalenmittelfläche und den Direktor beschrieben werden

$$\mathbf{x} = \mathbf{r} + \theta^3 \mathbf{a}_3 , \quad \bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{r}} + \theta^3 \bar{\mathbf{a}}_3 , \quad \theta^3 \in [-1, 1] , \quad (2.23)$$

und die beiden Konfigurationen stehen über den Vektor der Schalenmittelflächenverschiebungen \mathbf{v} sowie die Differenzverschiebungen \mathbf{w} des Direktors zueinander in eindeutiger Beziehung:

$$\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{r} + \mathbf{v} , \quad \bar{\mathbf{a}}_3 = \mathbf{a}_3 + \mathbf{w} , \quad (2.24)$$

$$\bar{\mathbf{x}} = (\mathbf{r} + \mathbf{v}) + \theta^3 (\mathbf{a}_3 + \mathbf{w}) , \quad \theta^3 \in [-1, 1] . \quad (2.25)$$

Das Verschiebungsfeld \mathbf{u} des Schalenkörpers Gl. (2.3) ergibt sich aus den Schalenmittelflächenverschiebungen \mathbf{v} und den Differenzverschiebungen \mathbf{w} zu:

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} + \theta^3 \mathbf{w}, \quad \theta^3 \in [-1, 1]. \quad (2.26)$$

Die Verschiebung wird somit durch die sechs Komponenten von \mathbf{v} und \mathbf{w} beschrieben, die 7-Parameter-Formulierung hat somit zunächst sechs Freiheitsgrade. Man beachte, dass das Verschiebungsfeld über den Ansatz Gl. (2.26) über die Schalendicke als linear veränderlich angesetzt ist, was auch den Begriff 'Semidiskretisierung' in Dickenrichtung geprägt hat.

Referenzkonfiguration

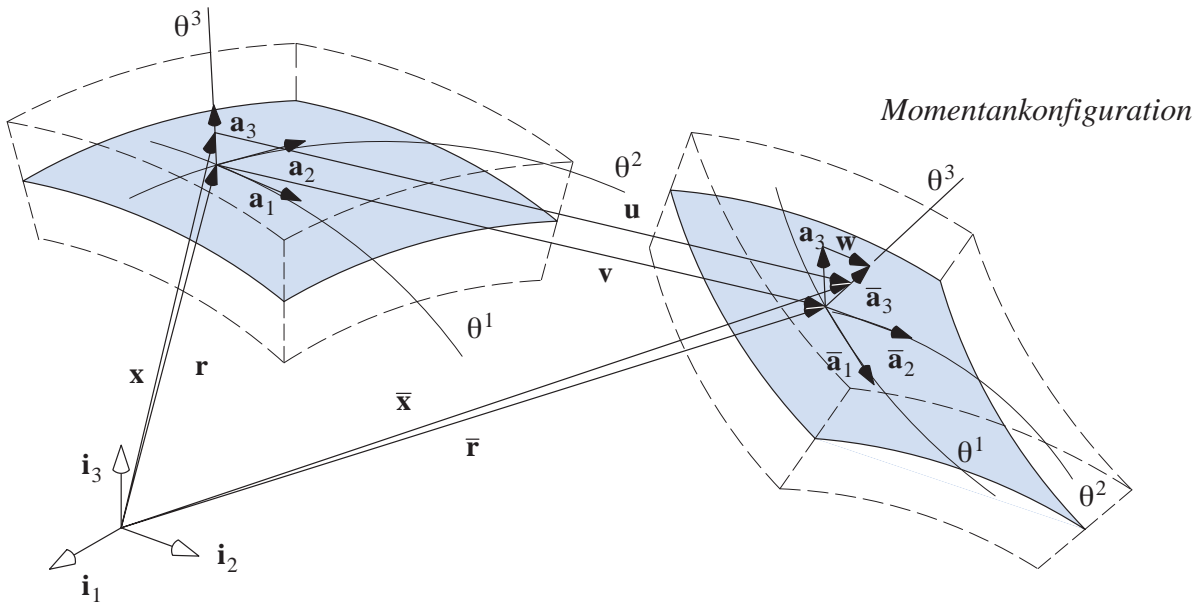


Abb. 2.3: Kinematik der 7-Parameter Schalenformulierung

Die Basisvektoren des krummlinigen Koordinatensystems in einem beliebigen Punkt des Schalenkörpers Gl. (2.1) und (2.2) lassen sich nun durch die Größen der Schalenmittelfläche Gl. (2.21) und (2.22) ausdrücken:

$$\mathbf{g}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta^\alpha} + \theta^3 \frac{\partial \mathbf{a}_3}{\partial \theta^\alpha} = \mathbf{a}_\alpha + \theta^3 \mathbf{a}_{3,\alpha}, \quad (2.27)$$

$$\mathbf{g}_3 = \mathbf{a}_3, \quad (2.28)$$

$$\bar{\mathbf{g}}_\alpha = \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial \theta^\alpha} + \theta^3 \frac{\partial \bar{\mathbf{a}}_3}{\partial \theta^\alpha} = \bar{\mathbf{a}}_\alpha + \theta^3 \bar{\mathbf{a}}_{3,\alpha}, \quad (2.29)$$

$$\bar{\mathbf{g}}_3 = \bar{\mathbf{a}}_3. \quad (2.30)$$

Aus den Verschiebungen Gl. (2.26) ergibt sich eine über die Schalendicke konstante Normalverzerrung E_{33}^u in Dickenrichtung. Der Kopfzeiger $(\cdot)^u$ soll die Abhängigkeit von den Verschiebungen anzeigen.

Wie eingangs erwähnt ist dies jedoch für ein asymptotisch korrektes Modell nicht ausreichend und führt bei von Null verschiedener Querkontraktionszahl zu einer künstlichen 'Versteifung',

dem sogenannten Poisson–Dickenlocking (Bischoff (1999)). Diese entsteht, da im Biegefall in Querrichtung aus der Querkontraktion über die Dicke linear verlaufende Quernormalspannungen auftreten, deren energetisch konjugierte linear verlaufenden Normalverzerrungen jedoch in der Kinematik nicht enthalten sind. Der Effekt tritt *unabhängig* von der Feinheit einer Diskretisierung auf und führt dazu, dass bei gegen Null tendierender Schalendicke die Lösung nicht der kontinuierlichen Schalentheorie entspricht, dass heißt nicht asymptotisch richtig ist. Die gesamten Quernormalverzerrungen lauten somit

$$E_{33} = E_{33}^u + \tilde{E}_{33} , \quad (2.31)$$

worin \tilde{E}_{33} den siebten Freiheitsgrad der 7–Parameter–Schalenformulierung darstellt. Die Komponenten des Green–Lagrangeschen Verzerrungstensors setzen sich demnach aus einem von den Verschiebungen abhängigen und einem unabhängigen Anteil zusammen:

$$E_{ij}^u = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{g}}_i \cdot \bar{\mathbf{g}}_j - \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j) \approx \alpha_{ij}^u + \frac{t}{2}\beta_{ij}^u , \quad \tilde{E}_{33} = \tilde{\beta}_{33} , \quad (2.32)_1$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^u + \tilde{\mathbf{E}} . \quad (2.32)_2$$

α_{ij} bezeichnen hierin über die Schalendicke konstante, β_{ij}^u und $\tilde{\beta}_{33}$ linear verlaufende Anteile. Die in Gl. (2.32)₁ links noch enthaltenen quadratischen Anteile von \mathbf{E}^u können unter gewissen Annahmen zur Schalenschlankheit vernachlässigt werden (Büchter et al. (1994)).

Die einzelnen kinematischen Variablen in Abhängigkeit von den Basisvektoren der Schalenmittelfläche sind:

$$\alpha_{\alpha\beta}^u = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{a}}_\alpha \cdot \bar{\mathbf{a}}_\beta - \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{a}_\beta) , \quad (2.33)$$

$$\beta_{\alpha\beta}^u = \frac{1}{t}(\bar{\mathbf{a}}_\alpha \cdot \bar{\mathbf{a}}_{3,\beta} + \bar{\mathbf{a}}_\beta \cdot \bar{\mathbf{a}}_{3,\alpha} - \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{a}_{3,\beta} - \mathbf{a}_\beta \cdot \mathbf{a}_{3,\alpha}) , \quad (2.34)$$

$$\alpha_{\alpha 3}^u = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{a}}_\alpha \cdot \bar{\mathbf{a}}_3 - \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{a}_3) , \quad (2.35)$$

$$\beta_{\alpha 3}^u = \frac{1}{t}(\bar{\mathbf{a}}_{3,\alpha} \cdot \bar{\mathbf{a}}_3 - \mathbf{a}_{3,\alpha} \cdot \mathbf{a}_3) , \quad (2.36)$$

$$\alpha_{33}^u = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{a}}_3 \cdot \bar{\mathbf{a}}_3 - \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_3) , \quad (2.37)$$

$$\beta_{33}^u = 0 , \quad (2.38)$$

$$\tilde{\beta}_{33} = \tilde{E}_{33} . \quad (2.39)$$

2.2.3 Dickenintegration des Stoffgesetzes und der Spannungen

Nachdem die Verzerrungen Gl. (2.32) vollständig in Größen der Schalenmittelfläche ausdrückbar sind (Gl. (2.33)–(2.39)), erfolgt nun die für die vollständige Dimensionsreduktion des Schalenkörpers nötige Reduktion der Spannungen und des Werkstoffgesetzes auf die

Schalenmittelfläche durch eine Vorabintegration dieser Größen in Schalendickenrichtung:

$$\int_V (\cdot) dV = \int_{A_\Omega} \int_{-1}^1 (\cdot) \hat{\mu} d\theta^3 dA . \quad (2.40)$$

Hierin ist V das Volumen von Ω und A die Mittelfläche des Schalenkörpers (Abb. 2.3). Der Betrag des sogenannten *Schalenshifters* $\hat{\mu}$ in Gl. (2.40) ergibt sich aus

$$\frac{dV}{dA} = \frac{((\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2) \cdot \mathbf{g}_3) d\theta^3 d\theta^2 d\theta^1}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| d\theta^2 d\theta^1} = \frac{((\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2) \cdot \mathbf{g}_3)}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|} d\theta^3 = \hat{\mu} d\theta^3 . \quad (2.41)$$

Die Integration der Spannungen \mathbf{S} zu Kraftgrößen ist

$$n^{ij} = \int_{-1}^1 S^{ij} \hat{\mu} d\theta^3 , \quad m^{ij} = \int_{-1}^1 S^{ij} \theta^3 \frac{t}{2} \hat{\mu} d\theta^3 , \quad (2.42)$$

und die der Materialtangente $\underline{\mathbb{C}}$ zum Werkstofftensor der Schalenformulierung \mathbf{D} lautet:

$$D_n^{ijkl} = \int_{-1}^1 (\theta^3)^n \mathbb{C}^{ijkl} \left(\frac{t}{2}\right)^n \hat{\mu} d\theta^3 , \quad n \in \{0, 1, 2\} . \quad (2.43)$$

$n^{\alpha\beta}$ und $n^{\alpha 3}$ sind Membran- und Querkräfte, die aus den über die Schalendicke konstanten Spannungsanteilen resultieren; $m^{\alpha\beta}$ sind Momente aus der Integration der linear veränderlicher Spannungsanteile. Für eine ausführliche Diskussion der Bedeutung der weiteren Kraftgrößen ($n^{33}, m^{33}, m^{\alpha 3}$) wird auf Bischoff (1999) und Bischoff und Ramm (2000) verwiesen.

Der Werkstofftensor der Schale \mathbf{D} setzt die kinematischen Variablen mit den Kraftgrößen in Beziehung. Unter der Annahme eines linearen Materialverhaltens gilt dann:

$$\begin{bmatrix} n^{ij} \\ m^{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_0^{ijkl} & D_1^{ijkl} \\ D_1^{ijkl} & D_2^{ijkl} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{kl} \\ \beta_{kl} \end{bmatrix} . \quad (2.44)$$

Hiermit sind alle Größen gegeben, um den Verzerrungsenergieausdruck im modifizierten Funktional von Hu–Washizu als Integral über die Schalenmittelfläche auszuwerten:

$$\int_V W^{int} dV = \int_A W_{2D}^{int} dA = \int_A \frac{1}{2} (n^{ij} \alpha_{ij} + m^{ij} \beta_{ij}) dA . \quad (2.45)$$

2.2.4 Variation und räumliche Diskretisierung

Ausgangspunkt der räumlichen Diskretisierung ist die Variation des modifizierten Funktionals von Hu–Washizu.

Auf die Herleitung der Variation der Mittelflächenbasisvektoren $\delta\mathbf{a}_i$ und $\delta\bar{\mathbf{a}}_i$ sowie der Variation der Verzerrungen

$$\delta\mathbf{E} = \delta\mathbf{E}^u + \delta\tilde{\mathbf{E}} \quad (2.46)$$

wird hier nicht näher eingegangen. Diese können detailliert dem Anhang in Bischoff (1999) entnommen werden. Gleiches gilt für die Variation des Funktionals von Hu–Washizu:

$$\begin{aligned} \delta\Pi_{HW}^{\text{mod}} = & \int_V \tilde{\mathbf{S}} : \delta\tilde{\mathbf{E}} + \mathbf{S}^u : \delta\mathbf{E}^u \, dV + \int_V \varrho \, \ddot{\mathbf{u}} \cdot \delta\mathbf{u} \, dV \\ & - \int_V \varrho \, \mathbf{b} \cdot \delta\mathbf{u} \, dV - \int_{A_N} \mathbf{t}_N \cdot \delta\mathbf{u} \, dA_N = 0 . \end{aligned} \quad (2.47)$$

Der Schalenkörper wird nun in eine endliche Anzahl finiter Teilgebiete zerlegt und diskretisiert. Die Diskretisierung muss an dieser Stelle nur noch über die Schalenmittelfläche durchgeführt werden, da der Verschiebungsansatz in Schalendickenrichtung vorab bestimmt und die Integration der Spannungen und des Stoffgesetzes über die Schalendicke bereits erfolgt ist.

Für die kontinuierlichen freien Variablen in Gl. (2.47) werden elementweise Ansatzfunktionen eingeführt:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_h &= N_n \mathbf{v}^n \quad , \quad \mathbf{w}_h = N_n \mathbf{w}^n \quad , & n &= 1, \dots, N_{nd}^{el} \\ \delta\mathbf{v}_h &= N_n \delta\mathbf{v}^n \quad , \quad \delta\mathbf{w}_h = N_n \delta\mathbf{w}^n \quad , & & \\ \tilde{\mathbf{E}}_h &= \tilde{M}_m \boldsymbol{\alpha}^m \quad , \quad \delta\tilde{\mathbf{E}}_h = \tilde{M}_m \delta\boldsymbol{\alpha}^m \quad , & m &= 1, \dots, N_{\alpha}^{el} \end{aligned} \quad (2.48)$$

wobei $N_n \in H^1$ (Sobolev–Raum der quadratintegrierbaren Funktionen mit quadratintegrierbaren ersten Ableitungen) die üblichen an den Elementübergängen stetigen Finite Element–Ansatzfunktionen sind und \mathbf{v}^n , \mathbf{w}^n und $\delta\mathbf{v}^n$, $\delta\mathbf{w}^n$ diskrete Knotenwerte der N_{nd}^{el} Knoten eines Finiten Elements darstellen. Die räumliche Diskretisierung der Geschwindigkeiten und Beschleunigungen erfolgt konform zu den in Gl. (2.48) angegebenen Ansätzen der Verschiebungsgrößen. $\tilde{M}_m \in L_2$ (Sobolev–Raum der quadratintegrierbaren Funktionen) sind die an den Elementübergängen nicht zwingend stetigen EAS–Ansatzfunktionen für die elementweise definierten Verzerrungsparameter $\boldsymbol{\alpha}^m$. Die Ansatzordnungen von N_n und \tilde{M}_m sind nicht voneinander unabhängig; eine ausführliche Diskussion der möglichen Kombinationen wird beispielsweise in Bischoff (1999) gegeben.

Fasst man die N_{nd}^{el} Verschiebungsfreiheitsgrade \mathbf{v}^n und \mathbf{w}^n und die N_α^{el} Verzerrungsfreiheitsgrade α^m eines Elementes zu Vektoren

$$\mathbf{d}^T = \left[\mathbf{v}^{1T} \quad \mathbf{w}^{1T} \quad \mathbf{v}^{2T} \quad \mathbf{w}^{2T} \quad \dots \quad \mathbf{v}^{N_{nd}^{el}T} \quad \mathbf{w}^{N_{nd}^{el}T} \right]^T \quad (2.49)$$

$$\boldsymbol{\alpha}^T = \left[\alpha^1 \quad \alpha^2 \quad \dots \quad \alpha^{N_\alpha^{el}} \right]^T \quad (2.50)$$

zusammen und verwendet eine matrizielle Darstellung der Elementansätze aus Gl. (2.48)

$$\mathbf{d}_h = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_h \\ \mathbf{w}_h \end{bmatrix} = \mathbf{N} \mathbf{d} \quad , \quad \delta \mathbf{d}_h = \mathbf{N} \delta \mathbf{d} \quad , \quad \tilde{\mathbf{E}}_h = \tilde{\mathbf{M}} \boldsymbol{\alpha} \quad , \quad (2.51)$$

so ergibt sich mit der Variation der Verzerrungen

$$\delta \mathbf{E}_h^u = \mathbf{E}_{h,d}^u \delta \mathbf{d} \quad , \quad \delta \tilde{\mathbf{E}}_h = \tilde{\mathbf{E}}_{h,\alpha} \delta \boldsymbol{\alpha} \quad , \quad (2.52)$$

für ein Finites Element nach Gl. (2.47) nun:

$$\begin{aligned} \delta \Pi_{HW}^{mod,el} = & \underbrace{\ddot{\mathbf{d}}^T \int_{A^{el}} \varrho \mathbf{N}^T \mathbf{N} dA^{el} \delta \mathbf{d}}_{\Rightarrow \mathbf{f}^{dyn}(\ddot{\mathbf{d}})} + \underbrace{\int_{A^{el}} \tilde{\mathbf{S}}_h \tilde{\mathbf{E}}_{h,\alpha} dA^{el} \delta \boldsymbol{\alpha}}_{\Rightarrow \tilde{\mathbf{f}}^{int}(\boldsymbol{\alpha})} + \underbrace{\int_{A^{el}} \mathbf{S}_h^u \mathbf{E}_{h,d}^u dA^{el} \delta \mathbf{d}}_{\Rightarrow \mathbf{f}^{int}(\mathbf{d})} \\ & - \underbrace{\left[\int_{A^{el}} \varrho \mathbf{b} \mathbf{N} dA^{el} + \int_{A_N} \mathbf{t}_N \mathbf{N} dA_N \right]}_{\Rightarrow \mathbf{f}^{ext}} \delta \mathbf{d} = 0 \quad . \end{aligned} \quad (2.53)$$

\mathbf{S}_h^u und $\tilde{\mathbf{S}}_h$ sind hierin Vektoren der approximierten, zu \mathbf{E}_h^u und $\tilde{\mathbf{E}}_h$ energetisch konjugierten statischen Variablen. Aus Gl. (2.53) folgen die inneren Kräfte \mathbf{f}^{int} als nichtlineare Funktionen der Verschiebungsgrößen. Nach der zeitlichen Diskretisierung mit einem impliziten Zeitintegrationsansatz erfolgt daher eine Linearisierung und iterative Lösung mit einem Newton–Iterationsverfahren.

2.3 Zeitdiskretisierung

Ziel der Zeitintegration ist es, Ansätze für die Verschiebungen, Geschwindigkeiten und Beschleunigungen zu wählen, die eine Lösung des räumlich bereits diskretisierten Gleichungssystems Gl. (2.53) zu diskreten Zeitpunkten erlaubt und als primäre Unbekannte lediglich die Knotenwerte der Verschiebungsgrößen verwendet. Dabei resultieren aus der nichtlinearen Strukturmechanik spezielle Anforderungen an die Zeitintegration hinsichtlich der Stabilität und Genauigkeit des Verfahrens. Während für lineare strukturmechanische Probleme implizite, unbe-

dingt stabile Zeitintegrationsverfahren wie die Verfahren der 'Newmark-Familie' (Newmark (1959)) schon seit geraumer Zeit existieren, sind unbedingt stabile Zeitintegrationsmethoden für die nichtlineare Strukturtechnik Gegenstand aktueller Forschung (Chung und Hulbert (1993), Simo und Tarnow (1994), Armero und Petöcz (1998), Armero und Romero (1999), Kuhl und Ramm (1999) und (2000) und weitere). Da eine umfassende Diskussion möglicher Zeitintegrationsmethoden an dieser Stelle nicht gegeben werden kann, erfolgt eine Konzentration auf das in dieser Arbeit ausschließlich verwendete sogenannte Generalized- α Verfahren (Chung und Hulbert (1993)), in der Formulierung, wie sie in Crisfield (1997) gegeben wird. Das Generalized- α Verfahren basiert auf den Newmark-Ansätzen in einem Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ mit $\Delta t = t_{n+1} - t_n$

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{n+1} &= \mathbf{d}_n + \Delta t \dot{\mathbf{d}}_n + \Delta t^2 \left(\left(\frac{1}{2} - \beta \right) \ddot{\mathbf{d}}_n + \beta \ddot{\mathbf{d}}_{n+1} \right), \\ \dot{\mathbf{d}}_{n+1} &= \dot{\mathbf{d}}_n + \Delta t \left((1 - \gamma) \ddot{\mathbf{d}}_n + \gamma \ddot{\mathbf{d}}_{n+1} \right) \end{aligned} \quad (2.54)$$

und führt zwei weitere Parameter α_m, α_f ein, mit deren Hilfe sich die numerische Dissipation hochfrequenter Schwingungsanteile bei gleichzeitiger minimaler Dissipation der niederfrequenten Anteile steuern lässt, indem im Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ interpoliert wird:

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{d}}_{n+\alpha_m} &= (1 - \alpha_m) \ddot{\mathbf{d}}_{n+1} + \alpha_m \ddot{\mathbf{d}}_n, \\ \dot{\mathbf{d}}_{n+\alpha_f} &= (1 - \alpha_f) \dot{\mathbf{d}}_{n+1} + \alpha_f \dot{\mathbf{d}}_n, \\ \mathbf{f}_{n+\alpha_f}^{int} &= (1 - \alpha_f) \mathbf{f}_{n+1}^{int} + \alpha_f \mathbf{f}_n^{int}, \\ \mathbf{f}_{n+\alpha_f}^{ext} &= (1 - \alpha_f) \mathbf{f}_{n+1}^{ext} + \alpha_f \mathbf{f}_n^{ext}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Setzt man die Newmark-Ansätze Gl. (2.54) und die Ansätze Gl. (2.55) in Gl. (2.53) ein, so erhält man nach einigen Umformungen und mit $\mathbf{f}^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a}) = \mathbf{f}^{int}(\mathbf{d}) + \tilde{\mathbf{f}}^{int}(\mathbf{a})$ das dynamische Gleichgewicht als nichtlineare Funktion der Freiheitsgrade:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{d}_{n+1}, \mathbf{a}_{n+1}) &= (1 - \alpha_f) \mathbf{f}_{n+1}^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a}) + \alpha_f \mathbf{f}_n^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a}) - (1 - \alpha_f) \mathbf{f}_{n+1}^{ext} - \alpha_f \mathbf{f}_n^{ext} \\ &\quad + \mathbf{M} \left[\frac{1 - \alpha_m}{\beta \Delta t^2} (\mathbf{d}_{n+1} - \mathbf{d}_n) - \frac{1 - \alpha_m}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{d}}_n - \left(\frac{1 - \alpha_m}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{d}}_n \right] = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Zur Lösung von Gl. (2.56) müssen die in den kinematischen Variablen nichtlinearen inneren Kräfte $\mathbf{f}^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a})$ linearisiert werden. Diese Linearisierung sowie die Kondensation der Verzerrungsfreiheitsgrade \mathbf{a} auf Elementebene werden im folgenden Kap. 2.4 gezeigt.

Die Kombination der Newmark-Parameter β und γ in Gl. (2.54) und der Interpolationsparame-

ter α_m und α_f in Gl. (2.55) bestimmen das Maß an numerischer Dissipation des Zeitintegrationsalgorithmus.

Bezeichnet man mit $\rho_\infty \in [0, 1]$ den Spektralradius des Verfahrens (siehe auch Kuhl (1996)), so ergeben sich aus der Wahl eines ρ_∞ diese vier Parameter zu:

$$\alpha_m = \frac{2\rho_\infty - 1}{\rho_\infty + 1} ; \quad \alpha_f = \frac{\rho_\infty}{\rho_\infty + 1} ; \quad \beta = \frac{1}{4} (1 - \alpha_m + \alpha_f)^2 ; \quad \gamma = \frac{1}{2} - \alpha_m + \alpha_f . \quad (2.57)$$

Mit $\rho_\infty = 1$ ist das Verfahren dissipationsfrei aber im nichtlinearen Fall nicht stabil. Bei einer Wahl von $\rho_\infty \in [0.85, 0.95]$ erhält man ein Maß an numerischer Dissipation in den hohen Schwingungsmoden, das zur Stabilisierung aller in dieser Arbeit gezeigten dynamischen Beispiele ausreichend war.

2.4 Linearisierung und effektive dynamische Strukturgleichung

Als letzter Schritt verbleibt die Linearisierung der inneren Kräfte f_{n+1}^{int} in Gl. (2.56) mittels einer nach dem linearen Term abgebrochenen Taylorreihenentwicklung:

$$f_{n+1}^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a}) = f_n^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a}) + \left. \frac{\partial f^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a})}{\partial \mathbf{d}} \right|_n (\mathbf{d}_{n+1} - \mathbf{d}_n) + \left. \frac{\partial f^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} \right|_n (\mathbf{a}_{n+1} - \mathbf{a}_n) . \quad (2.58)$$

Hierin ist mit Gl. (2.53) und nach Bischoff (1999)

$$\left. \frac{\partial f^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a})}{\partial \mathbf{d}} \right|_n = \underbrace{\int_{A^{el}} \mathbf{E}_{h,dd}^u \mathbf{S}_h^u + \mathbf{E}_{h,d}^u \mathbf{S}_{h,d}^u dA^{el}}_{\mathbf{K}_T^u} + \underbrace{\int_{A^{el}} \tilde{\mathbf{E}}_{h,\alpha} \tilde{\mathbf{S}}_{h,d} dA^{el}}_{\mathbf{L}^T} \quad (2.59)$$

und

$$\left. \frac{\partial f^{int}(\mathbf{d}, \mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} \right|_n = \underbrace{\int_{A^{el}} \mathbf{E}_{h,d}^u \mathbf{S}_{h,\alpha}^u dA^{el}}_{\mathbf{L}} + \underbrace{\int_{A^{el}} \tilde{\mathbf{E}}_{h,\alpha} \tilde{\mathbf{S}}_{h,\alpha} dA^{el}}_{\tilde{\mathbf{D}}} . \quad (2.60)$$

Die tangentielle Steifigkeitsmatrix der Verschiebungsfreiheitsgrade bestehen aus Anfangs-, materieller und geometrischer Steifigkeitsmatrix ist dann

$$\mathbf{K}_T^u = \int_{A^{el}} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dA^{el} + \int_{A^{el}} \mathbf{B}_{,d}^T \mathbf{S}_h^u dA^{el} , \quad (2.61)$$

\mathbf{L}^T und \mathbf{L} sind Kopplungsmatrizen und $\tilde{\mathbf{D}}$ die sogenannte Verzerrungsmatrix:

$$\mathbf{L}^T = \int_{A^{el}} \tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dA^{el} , \quad \mathbf{L} = \int_{A^{el}} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \tilde{\mathbf{M}} dA^{el} , \quad (2.62)$$

$$\tilde{\mathbf{D}} = \int_{A^{el}} \tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{D} \tilde{\mathbf{M}} dA^{el} . \quad (2.63)$$

Die Vektoren der inneren Kräfte sind

$$\mathbf{f}_n^{int}(\mathbf{d}) = \int_{A^{el}} \mathbf{E}_{h,d}^u \mathbf{S}_h^u dA^{el} , \quad \tilde{\mathbf{f}}_n^{int}(\mathbf{a}) = \int_{A^{el}} \tilde{\mathbf{E}}_{h,\alpha} \tilde{\mathbf{S}}_h dA^{el} . \quad (2.64)$$

Da die Interpolation der Verzerrungsfreiheitsgrade \mathbf{a} , beziehungsweise $\delta\mathbf{a}$ über die Elementgrenzen nicht stetig sein muss, lassen sich diese auf Elementebene kondensieren:

$$\hat{\mathbf{K}}_T = \left(\mathbf{K}_T^u - \mathbf{L} \tilde{\mathbf{D}}^{-1} \mathbf{L}^T \right) , \quad \hat{\mathbf{f}}_n^{int} = \left(\mathbf{f}_n^{int} - \mathbf{L} \tilde{\mathbf{D}}^{-1} \tilde{\mathbf{f}}_n^{int} \right) . \quad (2.65)$$

Gl. (2.56) kann nun mit einem Newton–Verfahren mit Iterationszähler k iteriert werden

$$\hat{\mathbf{K}}_{T_{n+1}}^{eff}(\mathbf{d}_{n+1}^k, \mathbf{a}_{n+1}^k) \Delta \mathbf{d} = - \mathbf{F}(\mathbf{d}_{n+1}^k, \mathbf{a}_{n+1}^k) \quad (2.66)$$

$$\Delta \mathbf{a} = - \tilde{\mathbf{D}}^{-1} \left(\tilde{\mathbf{f}}_{n+1}^{int} + \mathbf{L} \Delta \mathbf{d} \right) \quad (2.66)_1$$

$$\mathbf{d}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{d}_{n+1}^k + \Delta \mathbf{d}$$

$$\mathbf{a}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{a}_{n+1}^k + \Delta \mathbf{a}$$

$$k \leftarrow k + 1 ,$$

bis eine vom Anwender definierte Genauigkeit erreicht ist. Die Aktualisierung der Verzerrungsfreiheitsgrade Gl. (2.66)₁ erfolgt dabei auf Elementebene. Die effektive Steifigkeitsmatrix $\hat{\mathbf{K}}_{T_{n+1}}^{eff}$ in Gl. (2.66) lautet unter Verwendung der Linearisierung der inneren Kräfte Gl. (2.58) – (2.63) und der Gleichungen für die Kondensation der freien Verzerrungsvariablen Gl. (2.65):

$$\hat{\mathbf{K}}_{T_{n+1}}^{eff} = \left[\frac{1 - \alpha_m}{\beta \Delta t^2} \mathbf{M} + (1 - \alpha_f) \hat{\mathbf{K}}_{T_{n+1}} \right] . \quad (2.67)$$

Eine Angabe des Gesamtalgorithmus für eine Implementierung findet sich bei Mok (2001).

3 Softwareentwurf

3.1 Einführung

Die Entwicklungen im Bereich der zur Verfügung stehenden Simulationsmethoden, das Bestreben diese weiter zu entwickeln, als auch der Wunsch und die Notwendigkeit von der Leistungsfähigkeit der aktuell zur Verfügung stehenden Hardware Gebrauch zu machen, stellen hohe Anforderungen an ein Softwarekonzept. Einige wesentliche Anforderungen seien hier genannt, ohne Anspruch auf Vollständigkeit zu erheben:

- Eine hohe Laufgeschwindigkeit auf verschiedenen Computer- und Prozessortypen, gemessen in der durchschnittlichen Anzahl an Gleitkommazahl- und Ganzzahloperationen pro Zeiteinheit¹. Hierin ist bereits die Notwendigkeit enthalten, dass das Softwarekonzept eine parallele Abarbeitung auf Hardware mit mehreren bis zu sehr vielen Prozessoren unterstützt.
- Ein hohes Maß an Flexibilität des Softwarekonzeptes bezüglich der zur Anwendung kommenden Methoden zur Beschreibung, Diskretisierung und Lösung von kontinuumsmechanischen Fragestellungen. Als Beispiele können hier adaptive Diskretisierung, nichtkonforme Diskretisierungen, explizite und implizite Methoden der Zeitintegration, die Integration über zeitlich veränderliche Gebiete mit veränderlichen Randbedingungen, Form- oder Topologieoptimierungsprobleme und die Behandlung von oberflächen- oder volumengekoppelten Mehrfeldproblemen genannt werden.
- Die Simulationssoftware soll speziell im Bereich der Forschung leicht um neue Ansätze zu erweitern sein und dies mit Hilfsmitteln zur Fehlersuche und Evaluation, sowie mit der Bereitstellung von modularen 'Bausteinen' erleichtern, mit deren Hilfe neue Algorithmen zusammengesetzt werden können.
- Das Softwarekonzept muss auf Programmiersprachen und Bibliotheken basieren, von denen man auch bei rasant fortschreitenden Entwicklungen im Bereich der Hard- und Software erwarten kann, dass sie innerhalb der geplanten Nutzungsdauer der Software zur Verfügung stehen und auch auf kommenden Hardwaregenerationen über diesen Zeitraum effizient genutzt werden können.

1. Gemeint ist hier die real verstreichende Zeit ("wall-clock time"), im Gegensatz zu der ebenfalls häufig in der Literatur verwendeten rechnerischen Prozessorzeit ("CPU-time"), die die Dauer der exklusiven Nutzung eines Prozessors durch einen Vorgang misst.

Leider ist dieser Anforderungskatalog nicht widerspruchsfrei. So ist zum Beispiel der Wunsch nach gut verständlichen, hochorganisierten, flexiblen und leicht zu erweiternden Datenstrukturen in gewissem Umfang ein Widerspruch zur anzustrebenden hohen Laufgeschwindigkeit der Simulationssoftware, da hierfür wiederum Daten in möglichst einfacher Form – wie zum Beispiel in eindimensionalen Feldern des gleichen Datentyps – vorgehalten werden sollten. Einige wesentliche Punkte aus dem Softwarekonzept CCARAT, das im Rahmen dieser Arbeit geschaffen wurde, werden hier im folgenden beschrieben.

Anmerkung: *CCARAT ist das Forschungsprogramm des Instituts für Baustatik an der Universität Stuttgart, das als Nachfolger des Programms CARAT entwickelt wurde. Die im Programm CARAT vorhandenen Methoden und Algorithmen wurden weitestgehend übernommen, wohingegen die Datenstrukturen und deren Verwaltung neu angelegt wurden. Im Gegensatz zum Vorläufer CARAT ist CCARAT als parallele Software entworfen worden, so dass alle mit der Parallelität von CCARAT zusammenhängenden Aspekte Neuimplementierungen sind.*

Da hier keine vollständige Programmbeschreibung erfolgen soll und kann, werden einige wesentliche Besonderheiten der Software herausgegriffen und näher erläutert. Insbesondere wird auf das verwendete Parallelisierungskonzept, die Datenstrukturen für Mehrfeldprobleme und verteilte dünnbesetzte Matrizen eingegangen. So weit als möglich werden keine programmiersprachenspezifischen Ausdrücke verwendet, wobei an geeigneter Stelle zum besseren Verständnis einige Begriffe der Informatik erklärt werden müssen. Die in diesem Abschnitt beschriebenen Entwurfskonzepte beziehen sich nicht nur auf die in dieser Arbeit behandelten Problemkreise, sondern sind weiter gefaßt und erfassen beispielweise auch Mehrfeldprobleme und Aufgaben der Strukturoptimierung.

3.2 Kommunikationsmodelle für paralleles Rechnen

Es existieren eine Reihe von Programmiermodellen für parallele Software, wovon sich im speziellen OpenMP² (Open Multi Processing) und MPI³ (Message Passing Interface) zu Standards mit hoher Verbreitung entwickelt haben.

-
2. OpenMP ist ein nicht genormter Industriestandard der von einigen großen Hard- und Softwareherstellern gemeinsam entwickelt wurde und daher eine große Verbreitung gefunden hat. Der Standard wird von der OpenMP Architecture Review Board (ARB) verwaltet (<http://openmp.org>).
 3. MPI ist ein nicht genormter Industriestandard, der vom Message Passing Interface Forum verwaltet wird. In diesem Forum finden sich Vertreter von Hard- und Softwareherstellern sowie Anwendern wie Vertreter von Rechenzentren und Universitäten.

3.2.1 Open Multi Processing (OpenMP)

Bei OpenMP wird die Parallelität über explizit im Programmtext einzufügende Anweisungen realisiert, wobei Daten im Arbeitsspeicher zwischen den Prozessen nicht ausgetauscht werden brauchen, da diese für alle Prozesse gemeinsam vorliegen. Der gesamte, der parallelen Simulation zur Verfügung stehende Arbeitsspeicher, ist für alle Prozesse vollständig 'sichtbar' und verfügt über eine prozessübergreifende, einheitliche Speicheradressierung.

Anmerkung: Man spricht in diesem Fall strenggenommen nicht von unabhängigen Prozessen sondern von sogenannten 'leightweight processes', 'threads', oder 'tasks'. Die strenge Definition eines Prozesses beinhaltet einen von einem Prozess alleinig genutzten Speicheradressraum.

Diese sehr elegante Art der Parallelisierung mit OpenMP bringt einige Vorteile mit sich. So ist es verhältnismäßig einfach, ein bestehendes sequentielles Programm mittels OpenMP zu parallelisieren, da die Datenverwaltung nicht zwingend verändert werden muss, sondern nur die Anweisungen für die parallele Abarbeitung von Operationen eingefügt werden müssen. Auch die Zugriffsgeschwindigkeit eines Prozesses auf den gesamten Datenbestand ist hier vergleichsweise hoch. Es hat jedoch den entscheidenden Nachteil, dass eine mittels OpenMP parallelisierte Software nur auf Hardware eingesetzt werden kann, bei welcher alle Prozessoren auf einen gemeinsamen Arbeitsspeicher mit einem einheitlichen Adressraum zugreifen können (Abb. 3.1a). Dies stellt eine erhebliche Einschränkung in der Auswahl der Hardware dar.

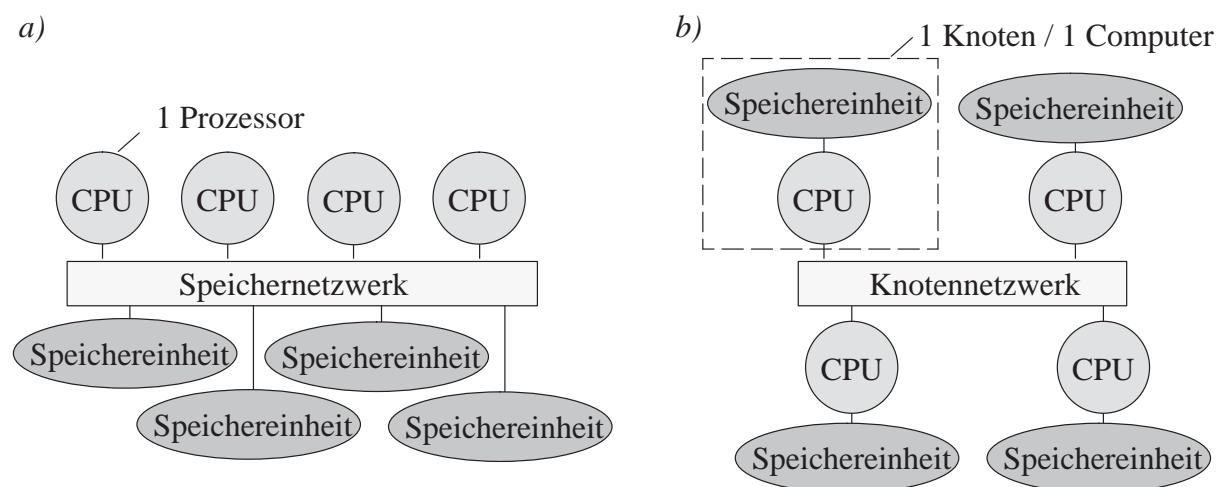


Abb. 3.1: Hardwarearchitekturen mit a) gemeinsamem Arbeitsspeicher
b) verteiltem Arbeitsspeicher

3.2.2 Message Passing Interface (MPI)

Auch bei einer Parallelisierung mit Hilfe von MPI (Message Passing Interface Forum (1995)) werden Kommunikationsanweisungen im Programmtext eingefügt. Anders als bei OpenMP ist der Arbeitsspeicher und dessen Adressierung für die Prozesse nicht einheitlich (es handelt sich

daher um eigenständige Prozesse im strengen Sinne), so dass ein Prozess nicht direkten Zugriff auf Daten hat, die sich im Speicher eines anderen Prozesses befinden. Der Austausch von Daten unter den Prozessen muss explizit über Kommunikationsanweisungen erfolgen. Die Parallelisierung eines Programmes mittels MPI ist daher aufwendiger und komplizierter. Auch liegt die Kommunikationsgeschwindigkeit von MPI in der Regel unter der Datenzugriffsgeschwindigkeit wie sie mit OpenMP erreicht werden kann. Dies erfordert eine andere Wahl des algorithmischen Parallelisierungskonzepts, auf das in diesem und im Kapitel 4 noch genauer eingegangen wird. Der große Vorteil einer Verwendung von MPI ist die hohe Flexibilität in der Auswahl der Hardware. Anwendungen unter MPI können auf Hardware mit verteiltem oder gemeinsamem Arbeitsspeicher (Abb. 3.1a) und b), sowie auf so genannten Clustern von Computern, die über ein Netzwerk verbunden sind, betrieben werden.

Die erzielbare Laufgeschwindigkeit eines parallelen Programms wird wesentlich beeinflusst durch die Art und Weise, wie die Kommunikation vom Entwickler realisiert, sowie wie sie in die Algorithmen eingebettet wird. Geschieht dies sorgfältig, so muss die gegenüber OpenMP langsamere Kommunikation kein Nachteil sein. Es besteht zum Beispiel bei MPI die grundsätzliche Möglichkeit, Kommunikation unter Prozessen mit Rechenoperationen zeitlich zu überlagern. Ist dies aus algorithmischer Sicht möglich, so lässt sich mittels dieser Überlagerung ein Großteil der Kommunikationszeiten 'verstecken'. Ein Beispiel für eine solche Überlagerung wird in Kap. 4.2 näher erläutert. Gleichzeitig ist natürlich die Auswahl von Algorithmen (sofern eine Wahlmöglichkeit besteht) vom Kriterium der Parallelisierbarkeit und der Möglichkeit zur Überlagerung von Kommunikation geprägt.

Vor allem aufgrund der hohen Flexibilität und der Verfügbarkeit von Hardware, auf welcher MPI-Anwendungen eingesetzt werden können, wurde die Parallelität von CCARAT mit MPI realisiert.

OpenMP und MPI können auch vorteilhaft miteinander kombiniert werden. Dies ist jedoch nur für ganz bestimmte Hardware sinnvoll, die eine Kombination aus der in Abb. 3.1a) und b) beschriebenen darstellt, und soll daher hier nicht weiter erläutert werden.

3.3 Datenstrukturen für parallele Simulation von Mehrfeldproblemen

3.3.1 Begriffsdefinitionen

Ohne auf eine spezifische Programmiersprache näher einzugehen, ist es zum Verständnis des Softwarekonzeptes in diesem Kapitel nötig, einige verwendete Begriffe näher zu bestimmen:

Datenstruktur

Die Datenstruktur eines Programms beschreibt die Organisationsweise, in der alle benötigten In-

formationen abgespeichert sind. Im Falle eines parallelen Programms auf Basis von MPI gehört hierzu auch die Art der Verteilung der Informationen über die Arbeitsspeicher der einzelnen Prozesse.

Zeigervariable, oder kurz: Zeiger

Eine Zeigervariable ist eine Variable, die eine hexadezimale Speicheradresse im Arbeitsspeicher enthält⁴. In einem Zeiger lässt sich die Adresse einer anderen Variablen oder die Startadresse eines Feldes von Variablen festhalten. Der Inhalt der Variablen, deren Adresse im Zeiger gespeichert ist, kann über den Zeiger gelesen und modifiziert werden. Zeigervariablen können auch die Adresse anderer Zeigervariablen enthalten. Sie sind hier ein wesentliches Element des Entwurfs der Datenstrukturen.

Zusammengesetzter Variablentyp, oder kurz: Struktur

Einige Programmiersprachen bieten die Möglichkeit, aus bestehenden Variablentypen neue, sogenannte zusammengesetzte Variablentypen oder Strukturen zu erstellen (Abb. 3.2). Es können dann Variablen (und Felder von Variablen) dieses neuen Strukturtyps definiert werden. Der mögliche Inhalt einer Struktur beschränkt sich nicht auf Fundamentaldatentypen wie natürliche oder reelle Zahlen. Auch andere Strukturen, Zeigervariablen und Datenfelder können Bestandteil einer Struktur sein. Um im weiteren Verlauf des Kapitels 3 Strukturtypen im Text hervorzuheben, werden sie *kursiv* gesetzt.

```
Typ FE_KNOTEN
{
  Knoten-ID      id
  Prozessnummer p
  Koordinaten    x[3]
  Feldgrößen     u[...]
  Elementzeiger  e[...]
}
```

Abb. 3.2: *Zusammengesetzter Variablentyp (Struktur) am Beispiel 'FE-Knoten'*

3.3.2 Geometriebeschreibung bei Mehrfeldproblemen

Kern der Datenstrukturen eines Finite-Element-Programmsystems ist die Beschreibung der Geometrie, deren Diskretisierung sowie der unterschiedlichen Arten von Randbedingungen. Der Softwareentwurf CCARAT verwendet zurzeit die kommerzielle, jedoch im besonderen Maß auf Bedürfnisse der Forschung zugeschnittene graphische Oberfläche GID (CIMNE (2003)) zur Erzeugung der Geometrie, zur Generierung von Diskretisierungen sowie zur Eingabe aller weiteren für die Simulation notwendigen Parameter. Die mittels GID eingegebene Geometriebeschreibung, die Diskretisierung und sonstige Simulationsparameter werden von GID in eine

4. Nicht alle Programmiersprachen bieten Zeigervariablen. Zeigervariablen sind Bestandteil von C, C++, Fortran90 und Fortran95, jedoch zum Beispiel nicht von Fortran77.

Textdatei geschrieben, die wiederum von CCARAT eingelesen wird. Eine interaktive Eingabe direkt in das Programm CCARAT ist im Regelfall nicht nötig und nicht vorgesehen, da Höchstleistungsrechner (vor allem an Rechenzentren) häufig keine direkte Interaktion mit dem laufenden Programm erlauben. Die Textdatei, die alle relevanten Angaben zum Problem enthält, wird von einem der Prozesse vom Speichermedium in den Arbeitsspeicher gelesen und an alle anderen Prozesse kommuniziert. Die Auswertung der Datei, die dann im Arbeitsspeicher jedes Prozesses vorliegt, und der Aufbau der Datenstruktur erfolgt dann parallel. Daher findet kein gleichzeitiger Zugriff aller Prozesse auf das Speichermedium statt. Zusätzlich ist das 'Lesen' im Arbeitsspeicher bedeutend schneller als der Zugriff auf ein externes Speichermedium. Die aus dieser Eingabeinformation generierte Datenstruktur folgt in ihrer Organisation drei wesentlichen Grundsätzen:

- Einzelne geometrische Objekte der Geometriebeschreibung und der Diskretisierungen sind hierarchisch miteinander verknüpft. Dies wird im folgenden noch näher erläutert.
- Es erfolgt eine Trennung der Datensätze in Geometriebeschreibung mit Randbedingungen einerseits und Diskretisierungen andererseits. Zwischen der Geometriebeschreibung und den Diskretisierungen nötige Bezüge werden bei Bedarf generiert und können wieder aufgelöst werden. Dies hat den Zweck, die geometrische Problembeschreibung unabhängig von der Diskretisierung der Gebiete zu halten, um eine adaptive Diskretisierung oder die Verwendung mehrerer Diskretisierungen einfach realisieren zu können.
- Bei Mehrfeldproblemen werden Diskretisierungen und weitere Simulationsparameter (wie z.B. Parameter der Zeitintegration) nach physikalischen Feldern getrennt gehalten, die Geometriebeschreibung des Gesamtproblems jedoch liegt geschlossen vor.

Diese auf den ersten Blick wenig anschaulichen Grundsätze lassen sich anhand eines einfachen Modell – Mehrfeldproblems leichter verständlich machen. Abb. 3.3 skizziert ein zweidimensionales, oberflächen- und volumengekoppeltes Fluid–Struktur–Interaktionsproblem, das mit einem partitionierten Lösungsansatz für die Fluid–Struktur–Wechselwirkung und einem ALE–Ansatz (Arbitrary Lagrangean Eulerian) für die Fluidlösung auf einem zeitlich veränderlichen Gebiet gelöst werden soll. Obwohl das Modellproblem zur besseren Visualisierung hier zweidimensional gewählt wird, erstreckt sich die Logik der Datenstrukturen analog auf dreidimensionale Probleme. Für eine detailliertere Beschreibung der Fluid–Struktur–Interaktion sowie der Fluid– und ALE–Formulierung selbst wird auf die Arbeiten von Wall (1999) und Mok (2001) verwiesen.

Das resultierende Dreifeldproblem (Fluidlösung auf teilweise bewegtem Netz, ALE-Netzbe-
 wegung, Strukturlösung) dient als Demonstrationsobjekt zur Veranschaulichung der entwickelten
 Datenstrukturen. Die Geometriebeschreibung setzt sich aus den geometrischen Bausteinen *Volu-
 men*, *Fläche*, *Linie* und *Punkt* zusammen. Diese Bausteine sind als Strukturen realisiert (siehe
 Kap. 3.3.1).

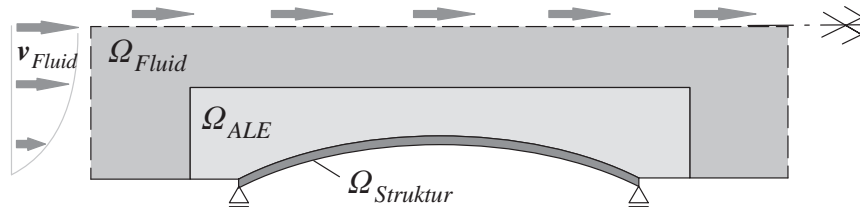


Abb. 3.3: Modellproblem: Kanalströmung über elastisches Hindernis

Die Verknüpfung der einzelnen geometrischen Bausteine erfolgt über in ihren Strukturen enthal-
 tene Zeiger. Hierbei wird eine Hierarchie der geometrischen Bausteine nach ihrer Komplexität
 verwendet. Das einfachstes Objekt ist der *Punkt*, gefolgt von *Linie*, *Fläche* und schließlich *Volu-
 men*. Der Begriff Hierarchie bedeutet dann, dass jeweils ein Baustein über Zeiger mit den ihn
 definierenden nächst-einfacheren als auch mit den durch ihn definierten nächst-komplexeren
 Bausteinen verknüpft ist.

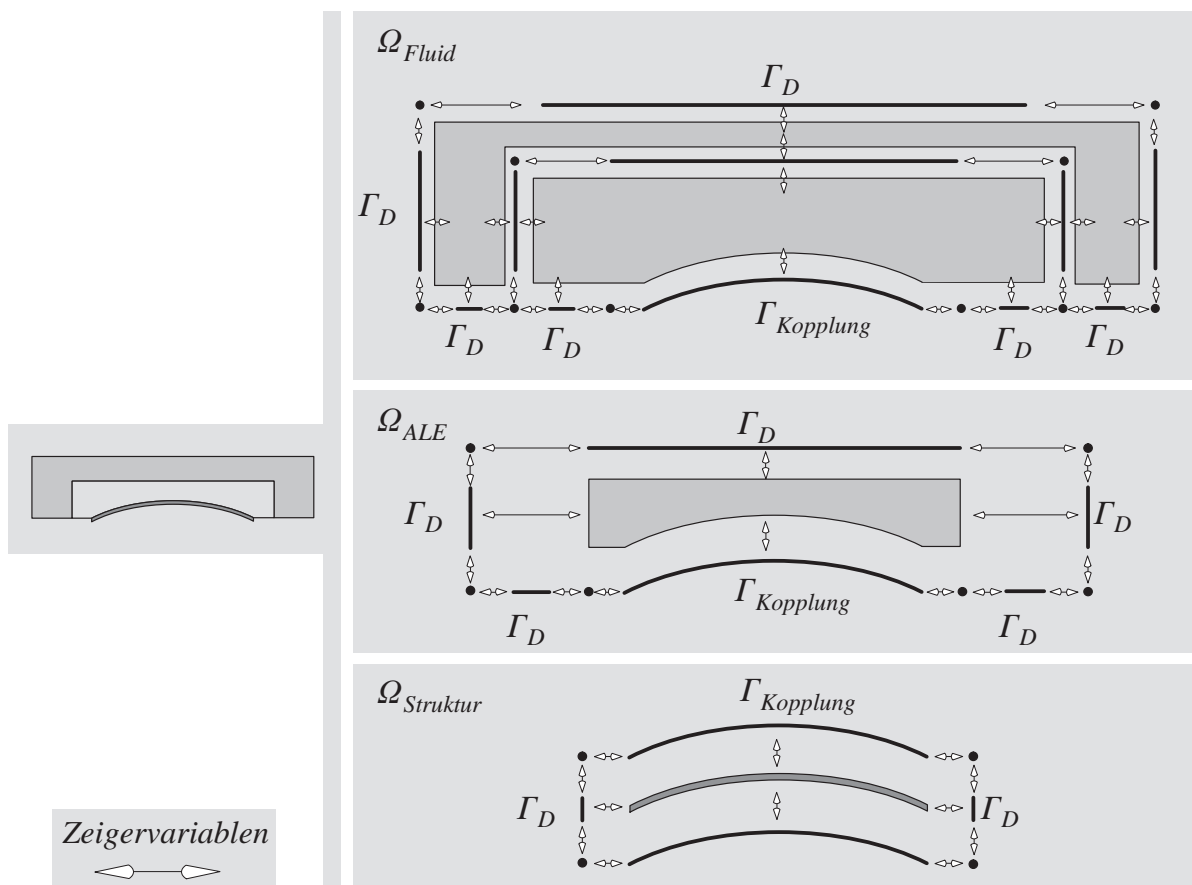


Abb. 3.4: Datenstruktur der Geometriebeschreibung – räumliche Darstellung

Angewandt auf das Modellproblem aus Abb. 3.3 ergibt sich der in Abb. 3.4 und Abb. 3.5 schematisch dargestellte Aufbau. Abb. 3.4 zeigt eine räumliche Darstellung der Verknüpfung der einzelnen geometrischen Objekte. Die Beziehungen zwischen den geometrischen Objekten unterschiedlicher physikalischer Felder existieren in Form von Kopplungsrandbedingungen $\Gamma_{Kopplung}$. Abb. 3.5 zeigt die gleiche Datenstruktur des Modellproblems symbolisch als Datensätze im Speicher eines Prozesses. In einer übergeordneten Struktur *Geometrie* sind die Anzahlen der geometrischen Strukturen gespeichert, sowie Vektoren der *Punkte*, *Linien*, *Flächen* und *Volumen* verankert. Die einzelne Vektorkomponente beschreibt einen geometrischen Baustein und enthält darüber hinaus Zeigervariablen zur hierarchischen Verknüpfung sowie zum 'Anhängen' aller vorkommenden Arten von Randbedingungen.

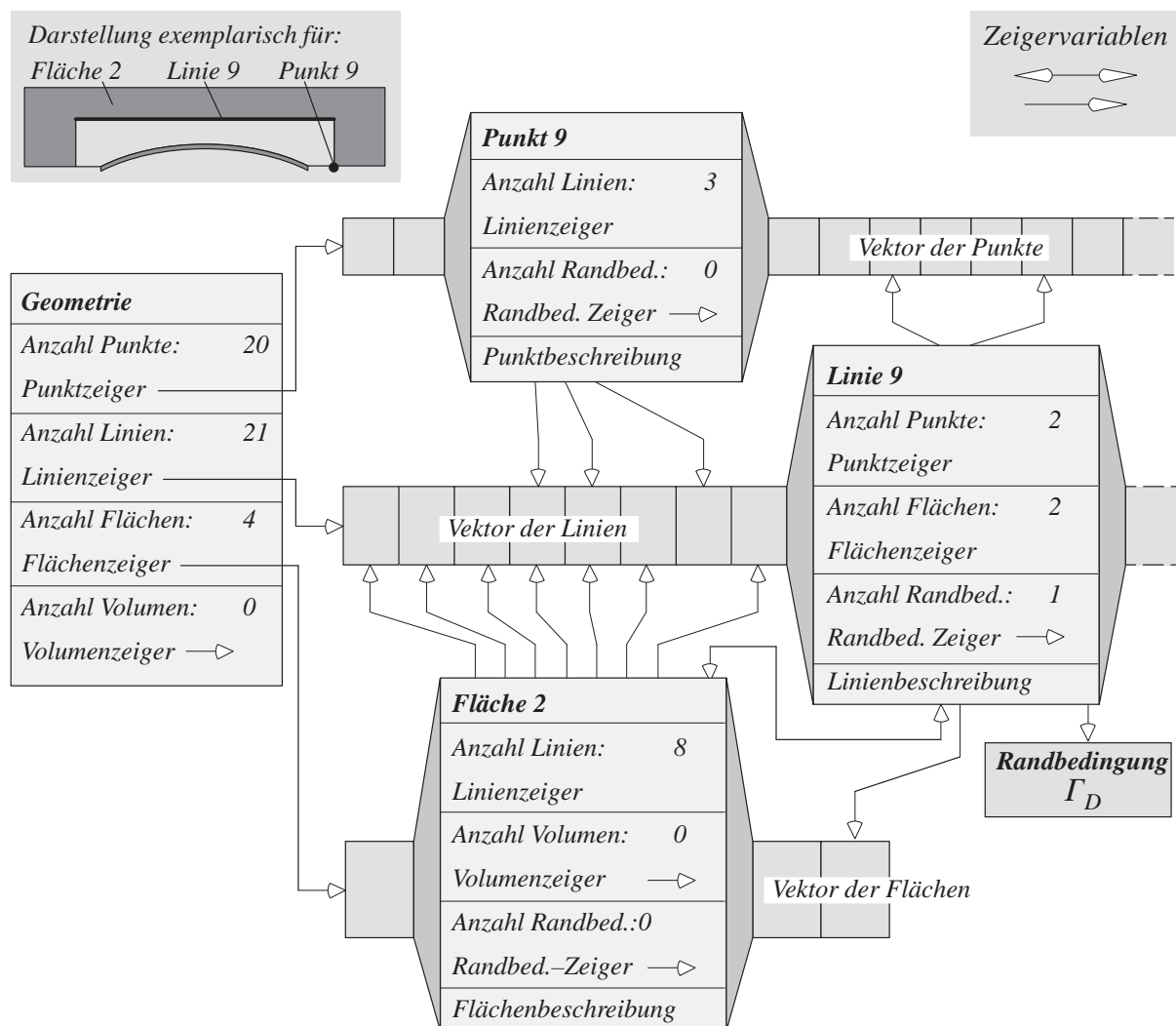


Abb. 3.5: Datenstruktur der Geometriebeschreibung – schematische Darstellung

Die gesamte Topologie kann bei dreidimensionalen und geometrisch anspruchsvollen Problemen eine sehr hohe Komplexität annehmen.

Problemstellungen, bei denen viel auf die Geometriebeschreibung zugegriffen und/oder diese modifiziert wird, wie zum Beispiel Fluid-Struktur-Interaktions-Simulationen, Formoptimie-

nung, Adaptivität oder Remeshing und geometrische Mehrgittermethoden, bietet diese Form der Datenhaltung ein hohes Maß an Flexibilität und Effizienz. Beispielsweise steht für eine Neuvernetzung eines (Teil-)Gebiets eine geschlossene Beschreibung des Gebietes samt Randbedingungen in einfacher Form zur Verfügung.

3.3.3 Datenstrukturen der Diskretisierung von Mehrfeldproblemen

Die Datenstruktur für die Diskretisierung folgt in wesentlichen Punkten einem ähnlichen Konzept wie die im vorangegangenen Kapitel beschriebene Datenstruktur der Geometriebeschreibung. Sie unterscheidet sich jedoch von dieser in einigen Punkten:

- Die Diskretisierungen der einzelnen physikalischen Felder sind voneinander getrennt.
- Es können für jedes Teilgebiet eines physikalischen Feldes mehrere Diskretisierungen vorgehalten werden
- Die Datenstruktur der Diskretisierung beinhaltet keine Randbedingungen.
- Außer den die Geometrie der Diskretisierung beschreibenden Strukturen gibt es noch die abstrakten Strukturen *Finites Element* und *Knoten*.

Um die Strukturen der Diskretisierung von denen der Geometriebeschreibung zu unterscheiden, werden erstere jetzt als *DVolumen*, *DFläche*, *DLinie* und *DPunkt* bezeichnet (*D*Struktur steht für *D*iskretisierungs-Struktur). Aus Gründen der Speichereffizienz sind diese Strukturen in ihrem Inhalt auf das nötigste reduziert, da sie in Abhängigkeit der Größe der Diskretisierung in sehr großer Anzahl gespeichert werden müssen (Abb. 3.6).

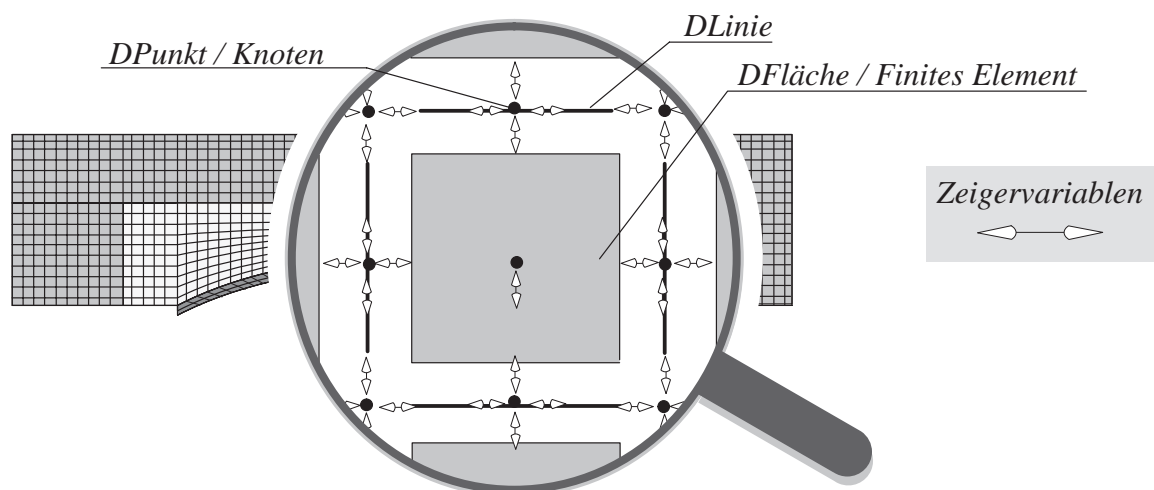


Abb. 3.6: Datenstruktur der Diskretisierungsbeschreibung – räumliche Darstellung
Dies bedeutet, dass geometriebeschreibende Daten nicht redundant in verschiedenen Strukturtypen gehalten werden. Sind beispielsweise die Punktkoordinaten in der Struktur *DPunkt* gegeben, so genügt zur Beschreibung einer *DLinie* mit quadratischem Verlauf die Kenntnis dreier

DPunkte. Die Knotenkoordinaten selbst werden daher in der *DLinie* nicht gespeichert. Die beiden zusätzlichen abstrakten Strukturtypen *Knoten* und *Finites Element* sind mit den ihnen entsprechenden geometrischen Strukturtypen verknüpft. Die Struktur *Finites Element* kann mit einer *DVolumen*-, *DFlächen*- oder *DLinien*-Struktur verknüpft sein, die Struktur *Knoten* nur mit einem *DPunkt*. Die zwei abstrakten Strukturtypen beinhalten die gesamten Informationen, die im Rahmen der Rechnung in einem Finiten Element bzw. an einem Knoten anfallen. So werden im *Knoten* die ermittelten diskreten Knotenwerte diskreter Feldgrößen gespeichert. Die Struktur *Finites Element* enthält neben seinen Topologiezeigern Angaben über den Typ des Elements, den Typ der Diskretisierung und den Typ des verwendeten Materials. Über einen speziellen 'Steckplatz' in der Struktur *Finites Element* können formulierungsspezifische Elementaufsätze eingefügt werden. So dient die im gesamten Mehrfeldproblem einheitliche Struktur *Finites Element* mittels dieses Aufsatzes für jeden beliebigen Formulierungstyp. Der formulierungsspezifische Elementaufsatz enthält die notwendigen spezifischen Datensätze, die Struktur *Finites Element* nur den 'kleinsten gemeinsamen Nenner' an Daten aller Formulierungen. Dieser besteht im Wesentlichen aus der geometrischen Topologie, dem Verweis auf ein Materialgesetz sowie einem Verweis auf den Typ der Ansatzfunktionen. Die Einheitlichkeit der Strukturen *Finites Element* und *Knoten* für alle Elementformulierungen ermöglicht eine große Rationalisierung bei den Algorithmen. Bei der programmtechnischen Umsetzung kann für alle Problemarten auf gemeinsame Routinen zurückgegriffen werden. Dies sind zum Beispiel Steuerroutinen der Gebietssintegration, der Assemblierung von Elementmatrizen sowie Suchalgorithmen oder Routinen zur Mehrfeldkopplung.

Für jedes physikalische Feld wird der Datensatz in einer Struktur *Feld* vorgehalten (Abb. 3.7). Diese kann mehrere unterschiedliche Diskretisierungen des gleichen Gebietes enthalten. Sie enthält überdies Verweise auf die in diesem Feld zum Einsatz kommenden Methoden und deren Steuerparameter.

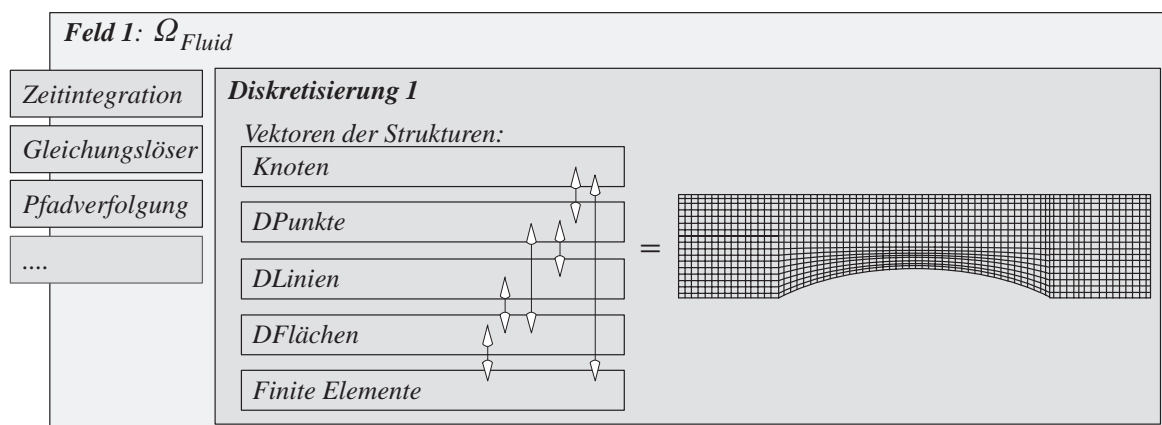


Abb. 3.7: Datenstruktur der Diskretisierungsbeschreibung (schematische Darstellung)

Die in Abb. 3.8 dargestellte Möglichkeit, mehrere Diskretisierungen für ein und denselben Körper vorhalten zu können, kann beispielsweise Anwendung finden in geometrischen Mehrgittermethoden, bei Adaptivität oder Remeshing.

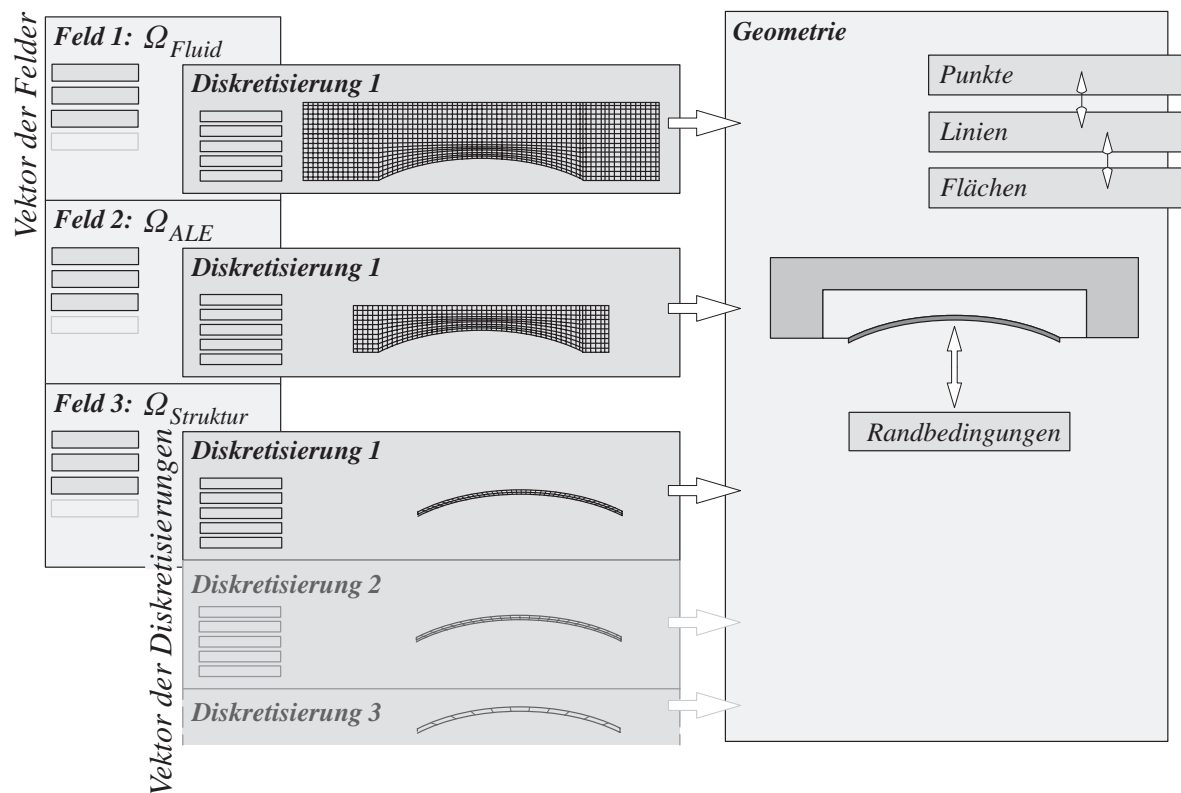


Abb. 3.8: Überblick über die geometrischen Datenstrukturen für Mehrfeldprobleme. Alle vorhandenen Diskretisierungen 'kennen' über Zeigervariablen ihre entsprechenden Bausteine der Geometriebeschreibung (Abb. 3.8). Auf diese Weise ist es möglich, alle Randbedingungen bei der Geometriebeschreibung anzusiedeln. Die Randbedingungen sind somit geometrisch eindeutig und brauchen beispielsweise bei einem Diskretisierungswechsel nicht übertragen werden.

Es soll nochmals betont werden, dass die Datenstrukturen hier exemplarisch an einem zweidimensionalen Mehrfeldbeispiel gezeigt wurden, jedoch im allgemeinen Fall weder auf diesen Problemtyp noch auf zweidimensionale Probleme beschränkt sind.

3.3.4 Datenstrukturen für Parallelität

Die parallele Abarbeitung von Rechenaufgaben stellt eigene Anforderungen an die Organisation von Daten im Arbeitsspeicher. Das in Kap. 3.2.2 vorgestellte MPI erzeugt eine Anzahl N^P voneinander unabhängig laufender Prozesse mit einem jeweils eigenen Arbeitsspeicherbereich, auf den durch die jeweils anderen Prozesse nicht direkt zugegriffen werden kann. Für alle Hardwareplattformen ist davon auszugehen, dass die Kommunikationsgeschwindigkeit unter den Prozessen auf einer deutlich größeren Zeitskala anzuordnen ist als die Rechengeschwindigkeit des Ein-

zelprozesses. Dies spielt sowohl beim Entwurf der parallelen Algorithmen (siehe auch Kap. 4), als auch beim Entwurf der Datenstrukturen eine prägende Rolle. Für die Datenstrukturen lassen sich demnach einige Grundsätze nennen:

- Die Art der Verteilung der Daten auf die einzelnen Prozesse sollte auf die anzuwendenden Methoden und Algorithmen abgestimmt sein.
- Die zu speichernden Daten sollten wie die Rechenbelastung gleichmäßig über die Prozessoren verteilt sein.
- Ein Parallelisierungskonzept, das einen übergeordneten Prozess (auf dem in erster Linie organisatorische Aufgaben wahrgenommen werden) und mehrere untergeordnete Prozesse (die die eigentliche Rechenarbeit verrichten) vorsieht, sollte vermieden werden. Dies führt schon bei einer kleinen Anzahl beteiligter Prozesse zu Kommunikationsengpässen und damit zu erheblichen Effizienzverlusten. Organisatorische Aufgaben sollten unter Prozessen dezentral und arbeitsteilig oder redundant durchgeführt werden.
- Die Vorhaltung von in die geometrischen Datenstrukturen eingebetteten Informationen zur Art der Verteilung der Datensätze steigert die Effizienz des Programms und erleichtert die Programmentwicklung.
- Für die Effizienz kann es von großem Vorteil sein, Daten redundant auf allen Prozessen zu speichern. Dies bedeutet, dass ein bestimmter Datensatz gleichzeitig in identischer Form im Arbeitsspeicher jedes Prozesses vorliegt und daher nicht kommuniziert werden muss.

Es wird hier von einem sogenannten grobgranularen Parallelisierungsansatz ausgegangen. Die Aufteilung der Rechenarbeit auf einzelne Prozesse erfolgt dabei in möglichst großen Einheiten von Anweisungen und Rechenzeit⁵. Damit wird angestrebt, dass Kommunikation möglichst selten und in verhältnismäßig großen Datenpaketen stattfindet. Die Wahl eines solchen grobgranularen Ansatzes entspricht den beschriebenen Kommunikationscharakteristika von MPI. Zudem stehen mit den diversen Gebietszerlegungsmethoden (siehe auch Kap. 4.5 und 6) eine Reihe von bereits weit entwickelten Methoden zur Verfügung, um diese Form der Parallelität zu realisieren. Um eine begriffliche Verwirrung zu vermeiden, wird hier im weiteren in Bezug auf die Datenstrukturen von Datenzerlegungs- und nicht von Gebietszerlegungsverfahren gesprochen.

5. Eine Definition von 'parallel granularity' nach Free Online Dictionary of Computing (wombat.doc.ic.ac.uk/foldoc/) ist: 'The size of the units of code under consideration in the context of parallelism. "fine grain parallelism" means individual tasks are relatively small in terms of code size and execution time, "coarse grain" means the opposite.'

Die Datenzerlegung wird mit Hilfe der Programmibliothek 'Metis' von Karypis und Kumar (1998) durchgeführt. Die Diskretisierung eines Gebietes wird hierbei als ungerichteter Graph aus Knoten und Kanten interpretiert, wobei jeder Diskretisierungsknoten einen Graphenknoten darstellt und diejenigen Graphenknoten über eine Kante miteinander verbunden sind, die an einem gemeinsamen Finiten Element anliegen.

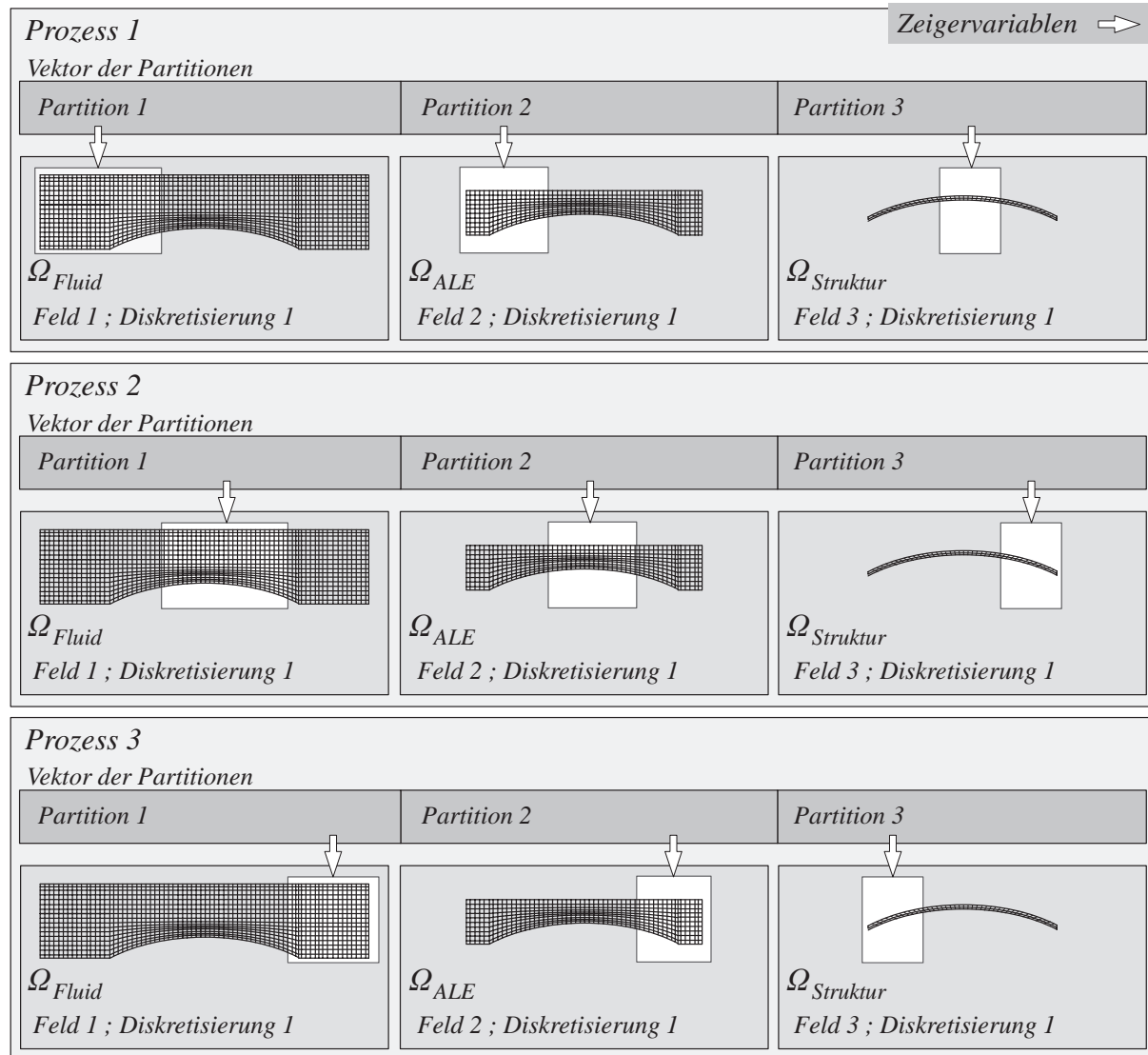


Abb. 3.9: Diskretisierungen dreier physikalischer Felder und deren Partitionen auf drei Prozessen (schematische Darstellung)

Dieser Graph wird dann in N^P möglichst gleichgroße Teile unterteilt, wobei die Anzahl der durchtrennten Kanten minimal sein soll. Es handelt sich hierbei um ein Optimierungsproblem, wofür 'Metis' effiziente Algorithmen zur Verfügung stellt, die jedoch an dieser Stelle nicht näher erläutert werden.

Anmerkung: Der ungerichtete Graph einer Diskretisierung entspricht der symmetrischen Belegungsstruktur der aus der Finite Elemente Diskretisierung resultierenden dünnbesetzten Systemmatrizen. Ein Knoten des Graphen entspricht dabei einem Hauptdiagonaleintrag

der Systemmatrix, während die Existenz eines von Null verschiedenen Nebendiagonaleintrages eine Kante repräsentiert. Da dieser Zusammenhang für alle Freiheitsgrade eines Diskretisierungsknotens gleich ist, genügt es zur Ermittlung des Graphen, je einen Freiheitsgrad pro Knoten zu betrachten. Zur Darstellung von Graphen können somit die gleichen Kompressionsspeicherformate für dünnbesetzte Matrizen verwendet werden, wie sie zur Speicherung der dünnbesetzten Systemmatrizen eingesetzt werden.

Aus der Graphpartitionierung lässt sich sowohl eine überlappende als auch eine nichtüberlappende Datenzerlegung ableiten. Da in dieser Arbeit nur überlappende Gebietszerlegungsverfahren zur parallelen Lösung innerhalb eines Feldes ausführlich behandelt werden, beschränkt sich die Beschreibung der Datenstruktur hier auf die überlappende Datenzerlegung.

Jeder Prozess besitzt neben der vollständigen Beschreibung der Geometrie den Vektor physikalischer Felder der Länge N_F . Für das Fluid–Struktur–Interaktions–Modellproblem Abb. 3.3 ist $N_F = 3$. Innerhalb eines physikalischen Feldes wiederum ist ein Vektor der Länge N_{DF} der Diskretisierungen dieses Feldes verankert (Abb. 3.8). Ein Prozess hat somit eine vollständige Beschreibung aller $N_F \times N_{DF}$ Diskretisierungen.

Zu jeder eigenständigen Diskretisierung gehört je eine Partition auf jedem Prozess. Wird das Modellproblem beispielsweise mit drei Prozessen bearbeitet, so ergibt sich die in Abb. 3.9 schematisch dargestellte Partitionierung der Diskretisierungen der einzelnen physikalischen Felder. Die Struktur Partition dient als Argument für den Aufruf der parallelen Gebietsintegration und der Assemblierung von Elementmatrizen und –vektoren zu verteilten Systemmatrizen und –vektoren.

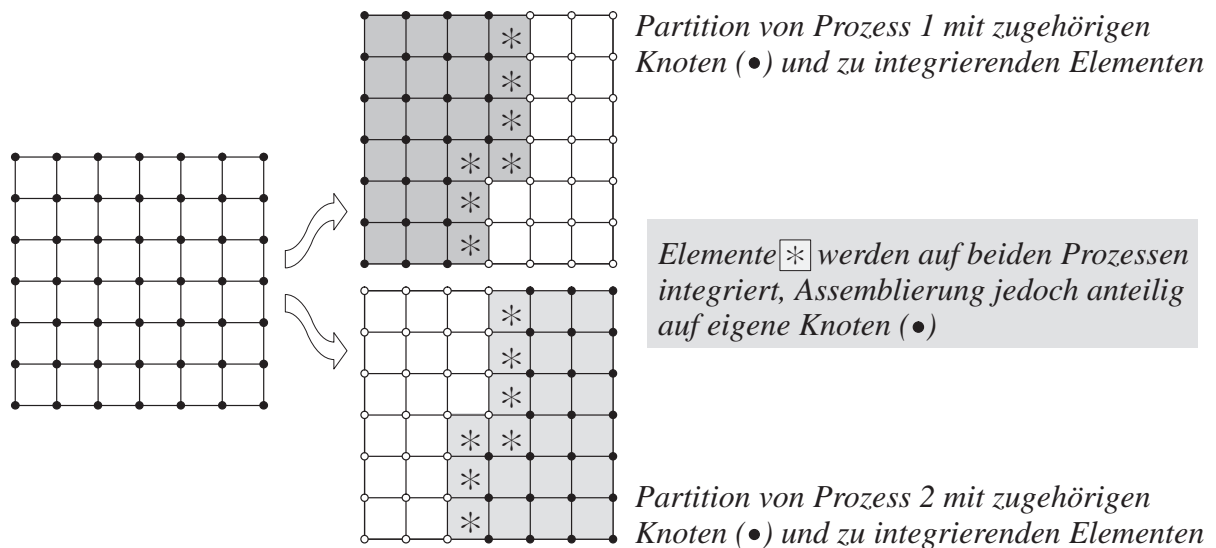


Abb. 3.10: Überlappende Gebietsintegration und parallele Assemblierung

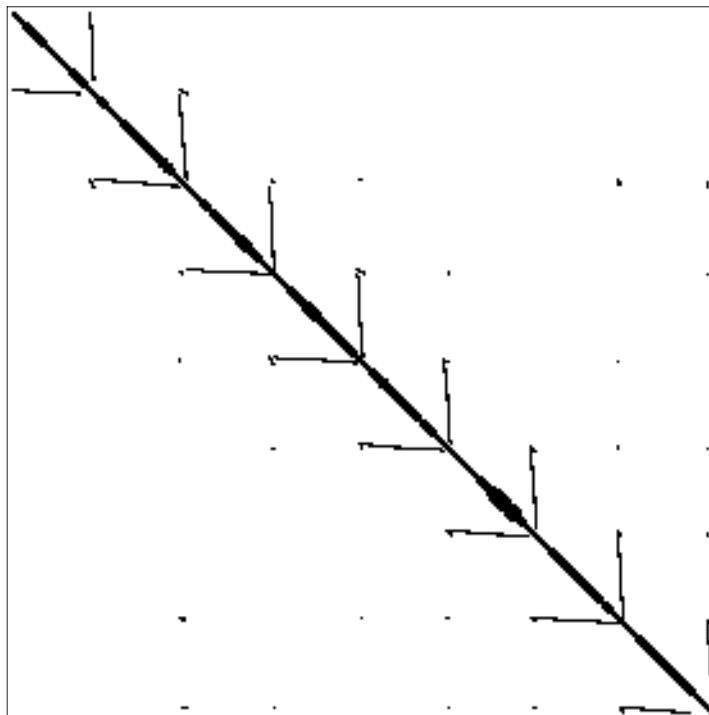
Im Falle einer überlappenden Datenzerlegung mit einer Überlappungsbreite von einer Elementreihe kann jeder Knoten einer Diskretisierung genau einem Prozess zugeordnet werden (Abb. 3.10). Die zugehörige Partition auf diesem Prozess besitzt Zeigervariablen für alle Knoten dieser Partition. Darüberhinaus finden sich in der Partition Zeiger für die *Finiten Elemente*, die an

diese Knoten angrenzen. Die *Finiten Elemente* sind im Überlappungsbereich Bestandteil mehrerer Partitionen und werden dort redundant bearbeitet. Bei der parallelen Assemblierung von Elementmatrizen und –vektoren von Elementen aus dem Überlappungsbereich berücksichtigen die Prozesse nur die Knoten, die zur eigenen *Partition* gehören. An einer Modelldiskretisierung wird dies in Abb. 3.10 für zwei Prozesse veranschaulicht.

Es handelt sich bei diesem Vorgang noch nicht um ein Gebietszerlegungsverfahren im klassischen Sinne, sondern um eine reine Datenzerlegung. Die assemblierten Systemmatrizen und Vektoren sind vollständig und entsprechen denen einer sequentiellen Integration und Assemblierung. Lediglich die Speicherung erfolgt verteilt über mehrere Prozesse. Dies ermöglicht eine vollständig kommunikationsfreie Gebietsintegration und Assemblierung zu dem Preis, dass Elemente der Überlappungsbereiche redundant integriert werden.

3.4 Verteilte dünnbesetzte Matrizen

Für dünnbesetzte, symmetrische und unsymmetrische Matrizen (Abb. 3.11) existiert eine große Auswahl unterschiedlicher Speicherformate (Saad (1994), Saad (1996)), wovon einige auch für die verteilte Speicherung von Matrizen geeignet sind. Die Belegungsstruktur mit von Null verschiedenen Werten einer dünnbesetzten Systemmatrix (Steifigkeits– oder Massenmatrix) ist bei einer feststehenden Diskretisierung gegeben, so dass benötigter Speicherplatz in einem Kompressionsspeicherformat vorab vorgehalten werden kann.



Matrix 'Rohr25980'
Speicherung auf 8 Prozessen
Zeilen und Spalten: 149 808
Nichtnulleinträge: 6 949 728

Abb. 3.11: Belegungsdiagramm ('Speichermaske') einer verteilten dünnbesetzten Matrix mit von Null verschiedenen Werten

Im Kontext der impliziten Kontaktformulierung in Kap. 7, bei den Mehrlevelverfahren in Kap. 6, aber auch bei anderen Problemstellungen wie adaptiver Diskretisierung, Remeshing oder dynamischer Lastbalancierung zwischen Prozessen tritt das Problem auf, dass die Belegungsstruktur der dünnbesetzten Systemmatrizen nicht vorab bestimmt werden kann. Es kann daher also keine passende 'Speichermaske' für diese vorgehalten werden. In diesem Fall ist es nötig, diese Speichermaske effizient anpassen zu können.

Hier soll auf zwei Speicherformate eingegangen werden, die sich einerseits für eine verteilte Speicherung als auch zur adaptiven Größenanpassung eignen. Dies sind das 'Distributed Compressed Sparse Row Format' (DCSR) und das 'Distributed Orthogonal Linked List Format' (DOLL).

3.4.1 'Distributed Compressed Sparse Row' Format (DCSR)

Die Zeilen- und Spaltendimension einer Matrix A sollen mit N^i und N^j bezeichnet werden. $N^{i,P}$ ist die Anzahl Zeilen von A , die auf Prozess P gespeichert sind. $N^{nz,P}$ ist die Anzahl aller von Null verschiedenen Einträge der auf Prozess P gespeicherten $N^{i,P}$ Zeilen von A . Die Zeilenindizes dieser $N^{i,P}$ Zeilen eines Prozesses P müssen dabei aufsteigend, jedoch nicht notwendigerweise zusammenhängend sein.

Das DCSR-Format besteht aus drei sogenannten Indexvektoren ua^P , ia^P und ja^P der Längen $N^{i,P}$, $N^{i,P} + 1$ und $N^{nz,P}$, sowie aus dem Wertevektor a^P der Länge $N^{nz,P}$ auf jedem Prozess.

Die Belegung der einzelnen Vektoren bei einer Speicherung auf $N^P = 3$ Prozessen wird anhand eines Beispiels in Abb. 3.12 gezeigt. In dem Beispiel wird angenommen, dass die vollständige Belegungsstruktur von A nicht vorab bekannt ist und daher für die Dimension $N^{nz,P}$ der Vektoren ja^P und a^P nur eine Schätzung $\tilde{N}^{nz,P}$ vorliegt.

a) zeilenweise verteilte Matrix $A^{N^i \times N^j}$, $N^i = 5$, $N^j = 6$

$$A^{5 \times 6} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} j \rightarrow \\ \downarrow i \\ \begin{array}{|cccccc|} \hline 1. & 2. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ \hline 3. & 4. & 0. & 5. & 0. & 0. \\ \hline 0. & 6. & 7. & 8. & 9. & 0. \\ \hline 0. & 0. & 5. & 6. & 0. & 0. \\ \hline 0. & 0. & 0. & 0. & 9. & 2. \\ \hline \end{array} \end{array} \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array} \end{array}$$

b) DCSR-Format exemplarisch für Prozess $P=1$ ($N^{i,P} = 2$, $\tilde{N}^{nz,P} = 10$)

$$ua^P = [1 \quad 3] \quad \begin{array}{l} \text{Zeilenindizes } i \text{ der Zeilen,} \\ \text{die auf Prozess } P = 1 \text{ gespeichert sind} \end{array}$$

$$a^P = [[0.] [0.] \quad 1. \quad 2. \quad [0.] [0.] \quad 6. \quad 7. \quad 8. \quad 9.] \quad \text{Nichtnulleinträge } A_{ij} \text{ (zeilenweise)}$$

$$ja^P = [[-1] [-1] \quad 1 \quad 2 \quad [-1] \quad [-1] \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5] \quad \begin{array}{l} \text{Spaltenindex } j \text{ von } A_{ij} \text{ in } a^P \\ (-1 \text{ für freien Speicherplatz}) \end{array}$$

$$ia^P = [1 \quad 5 \quad 7] \quad ia(i) \text{ ist Beginn von Zeile } i \text{ in } a^P \text{ und } ja^P$$

([]) unbenutzter Speicherplatz

Abb. 3.12: Adaptive 'Distributed Compressed Sparse Row' Speicherformat (DCSR)

In ja^P und a^P in Abb. 3.12 ist für alle Zeilen von A noch unbenutzter Speicherplatz vorhanden (Jede Zeile hat eine gewisse 'Ellbogenfreiheit'). Somit können weitere von Null verschiedene Einträge hinzugefügt werden, ohne die Vektoren ja^P und a^P in ihrer Länge zu ändern. Dieses Hinzufügen von Einträgen geschieht mittels Assemblierungsroutinen, die anhand der Indexwerte in ja^P solchen freien Speicherplatz erkennen und gegebenenfalls verwenden. Ist kein freier Speicherplatz für einen weiteren Eintrag vorhanden (Die 'Ellbogenfreiheit' der Zeile ist aufgebraucht), so müssen die Vektoren ja^P und a^P vergrößert und deren Inhalt entsprechend verschoben werden, um neuen freien Speicherplatz in den Zeile zu erhalten.

Im Gegensatz zu anderen zeilenorientierten Speicherformaten (wie zum Beispiel dem 'Modified-Sparse-Row-Format' bei Tuminaro et al. (1999)) eignet es sich auch für nichtquadratische dünnbesetzte Matrizen, wie sie bei der Multilevelvorkonditionierung in Kap. 6 benötigt werden. Zur Effizienzsteigerung paralleler Algorithmen wie etwa einer parallelen iterativen Gleichungslösung können an die Zeilenummerierung weitere Anforderungen gestellt werden. Eine sinnvolle Zeilenummerierung von A etwa ist, dass alle Zeilen, die auf einem Prozess P gespeichert sind kontinuierlich aufsteigend sind, wobei zuerst diejenigen Zeilen i gespeichert werden, die ausschließlich sogenannte 'Innerprozess-Nebendiagonaleinträge' enthalten. Dies sind Einträge mit Indexpaarungen ij , $i, j = 1, \dots, N$, bei denen sowohl Zeile i als auch Zeile j auf dem gleichen Prozess liegen. Nach diesen folgen dann diejenigen Zeilen, die auch 'Interprozess-Neben-

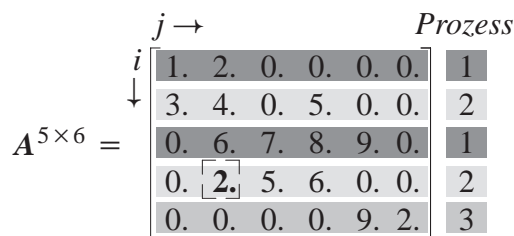
diagonaleinträge' enthalten. Bei diesen liegen Zeilen i und j auf verschiedenen Prozessen. In parallelen Algorithmen wie beispielsweise einem parallelen Matrix-Vektor-Produkt (Kap. 4.2) ist somit vorab bekannt, welche Zeilen kommunikationsfrei und welche nur kommunikationsbehaftet bearbeitet werden können. Das DCSR-Speicherformat ist mit seiner Zeilensortierung in erster Linie für iterative Methoden entworfen und wird im Rahmen dieser Arbeit für die multilevelvorkonditionierte iterative Lösung linearer Gleichungssysteme verwendet (Kap. 6).

3.4.2 'Distributed Orthogonal Linked List' Format (DOLL)

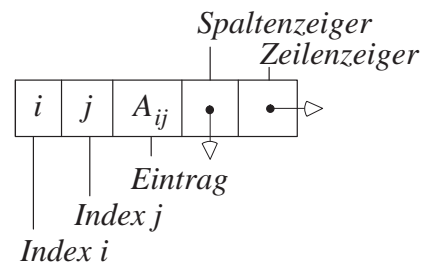
Das DOLL-Format beruht auf dem in Eberhard (2000) beschriebenen Orthogonal-Linked-List-Format (OLL). Es verwendet zusammengesetzte Datentypen (Strukturen) und Zeigervariablen und erstellt aus diesen eine zweidimensionale Datenstruktur, in der die von Null verschiedenen Einträge einer dünnbesetzten Matrix gespeichert sind (Abb. 3.13a). Für jeden von Null verschiedenen Wert A_{ij} wird eine Struktur *Wert* angelegt, die A_{ij} selbst, seine Indizes i und j sowie zwei Zeigervariablen enthält (Abb. 3.13b).

Mittels dieser Zeigervariablen wird in Zeilen- und Spaltenrichtung eine verkettete Liste aufgebaut. Jeder Prozess $P = 1, \dots, N^P$ hält zwei Vektoren von Zeigervariablen ir^P und jc^P der Längen \tilde{N}^i und \tilde{N}^j als Schätzungen der Dimensionen N^i und N^j von A . Diese Vektoren dienen als Anfang für die verketteten Listen der einzelnen Einträge.

a) Matrix A



b) Struktur 'Wert'



c) Hinzufügen von A_{42} auf Prozess $P=2$

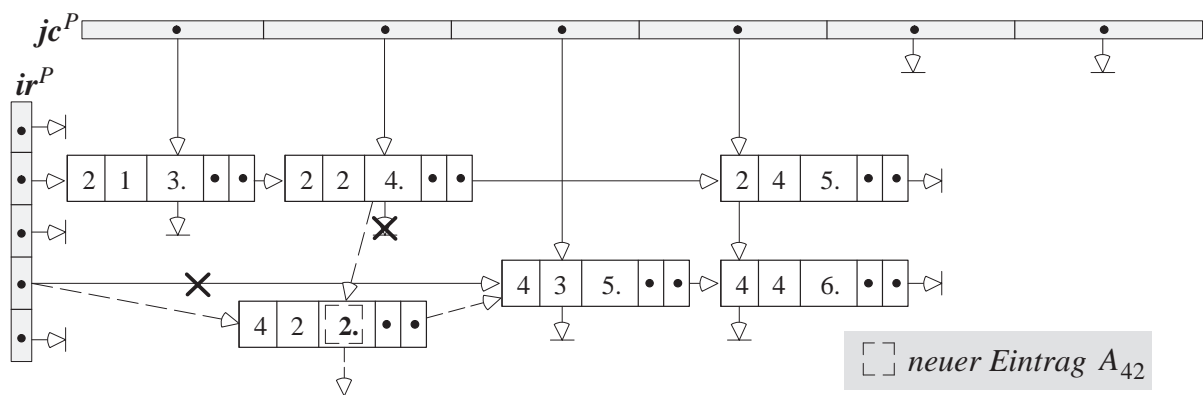


Abb. 3.13: Adaptive 'Distributed Orthogonal Linked List' Speicherformat (DOLL)

Soll ein neuer Wert $A_{ij} \neq 0$ in A hinzugefügt werden, so wird eine neue Struktur *Wert* in der verketteten Liste der Zeile i erzeugt und über die Zeigervariablen der Zeile eingebunden. Dann werden die Zeigervariablen der Spalte j angepasst (Abb. 3.13c). Die Matrix ist über die Redefinition der Länge der Vektoren ir^P und jc^P in ihrer Größe variabel.

Der wesentliche Vorteil dieser zweidimensional verketteten Liste ist die Möglichkeit, an einem beliebigen Ort in A einen neuen Eintrag hinzuzufügen oder löschen zu können, ohne dass bereits vorhandene Einträge verschoben oder kopiert werden müssten. Auch ist der Zugriff auf einzelne Spalten und Zeilen gleichermaßen direkt möglich, so dass sich dieses Speicherformat im Gegensatz zum DCSR-Format auch für direkte Gleichungslösungsalgorithmen, sowie für Vorkonditionierungen auf der Basis von unvollständigen Faktorisierungen (siehe auch Kap. 4) eignet (Saad (1996)). Wesentlicher Nachteil dieses Speicherformats ist, dass Algorithmen, die mit zusammengesetzten Variablentypen (hier der Struktur *Wert*) operieren, vom Compiler nur sehr schlecht auf Geschwindigkeit optimiert werden können (Küster (2001)). Das Speicherformat wurde für die Multilevel-Gebietszerlegungsmethoden in Kap. 6 versuchsweise eingesetzt, wobei sich bezüglich der Laufgeschwindigkeit das DCSR-Format aus Kap. 3.4.1 als überlegen herausstellte. Diese Beobachtung deckt sich mit der Aussage von Saad (1996), dass das bei den direkten Lösungsalgorithmen weit verbreitete OLL-Format inzwischen vermehrt von anderen Speicherformaten abgelöst wird, die in der Speichermaske der Matrix zeilen- oder spaltenweise eine gewisse Menge Speicherplatz als 'Ellbogenfreiheit' vorhalten. Das DOLL-Format eignet sich sehr gut für die Assemblierung von Systemmatrizen, wenn deren Belegung und/oder die Anzahl der Freiheitsgrade im System nicht vorab bekannt sind, wie dies zum Beispiel im Falle von Kontakt (Kap. 7) oder diskreter Rißmodellierung (El Amin (2003)) auftritt. Vor der Lösung eines linearen Gleichungssystems mit A als Koeffizientenmatrix sollte diese jedoch auf ein anderes, im Sinne der Informatik 'schnelleres' Speicherformat übertragen werden.

4 Parallele Algorithmen und Vorkonditionierung

*'If it takes one man one minute to dig a post-hole
then sixty men can dig it in a second.'*

frei nach Amdahls Gesetz, Free On-line Dictionary of Computing (FOLDOC)

Das obenstehende Zitat veranschaulicht auf sehr elegante Weise die Schwierigkeiten einer kooperativen, beziehungsweise parallelen Problembearbeitung. Amdahls Gesetz (Amdahl (1967)) über die parallele Bearbeitung von Aufgaben besagt: Wenn α^{seq} mit $0 \leq \alpha^{seq} \leq 1$ derjenige Anteil einer Rechenaufgabe ist, der nur sequentiell ausgeführt werden kann, und $(1 - \alpha^{seq})$ denjenigen Anteil darstellt, der parallelisierbar ist, so ist die durch den Einsatz von N^P Prozessen maximal erzielbare Beschleunigung (speedup):

$$\frac{1}{\alpha^{seq} + \frac{(1 - \alpha^{seq})}{N^P}} \quad (4.1)$$

Diese Beschleunigung muss jedoch als ein idealer Grenzwert betrachtet werden, bleiben in (4.1) doch Kosten der Kommunikation und der Organisation der Parallelität unberücksichtigt, die bei einer sequentiellen Problembearbeitung nicht anfallen.

Die Höhe der Kommunikations- und Organisationskosten wird von dem zu parallelisierenden Algorithmus geprägt und verhält sich im allgemeinen weder in der Anzahl der Prozesse, der Problemgröße oder dem Verhältnis Prozessanzahl zu Problemgröße linear: Man kann vermutlich zu zweit ein Pfostenloch schneller graben als alleine, mit sechzig Beteiligten (hohe Prozessanzahl bei kleiner Problemgröße) wird man wohl eher eine verlängerte Bearbeitungszeit erzielen (infolge uferloser Organisations- und Kommunikationskosten im Verhältnis zur Problemgröße).

4.1 Einführung

Nachdem im vorangegangenen Kapitel Aspekte der Datenstrukturen diskutiert wurden, werden hier ausgewählte Algorithmen angesprochen, wie sie im Rahmen eines parallelen Finite Element-Programmes benutzt werden. Einige der grundlegenden und wesentlichen 'Schlüsselalgorithmen' eines solchen Programmes sind:

- parallele iterative oder direkte Gleichungslösung für dünnbesetzte lineare Gleichungssysteme (Kap. 4.3.1 und 4.3.3)
- parallele und sequentielle Vorkonditionierung für die iterative Gleichungslösung (Kap. 4.4 und 6)
- parallele Eigenwertanalyse für dünnbesetzte verteilte Matrizen
- paralleles Matrix-Vektor-Produkt für verteilte Vektoren und Matrizen (Kap. 4.2)

- inneres Produkt verteilter Vektoren
- Addition verteilter Vektoren
- Normen verteilter Vektoren und Matrizen
- Graphpartitionierung, Datenzerlegung sowie Gebietsintegration und parallele Assemblierung von Elementmatrizen und –vektoren zu verteilten Systemmatrizen und Vektoren (Kap. 3.3.4)

Diese Liste kann natürlich leicht um komplexere Algorithmen wie beispielsweise Suchalgorithmen, Neuvernetzung, dynamische Lastbalancierung und vieles mehr erweitert werden. Da eine Beschreibung aller Punkte nicht die Intention dieser Arbeit ist, wird hier nur auf einen Teil dieser 'Schlüsselalgorithmen' eingegangen. Die grundsätzlichen Wesenszüge eines parallelen Algorithmus werden am Beispiel des parallelen Matrix–Vektor–Produkts in Kap. 4.2 demonstriert. Daher wird auf die Abhandlung der (einfacheren) Algorithmen für das innere Vektorprodukt, die Vektoraddition oder die Bildung von Normen verzichtet.

Auf eine Behandlung von Eigenwertlösemethoden wird zugunsten der ausführlichen Diskussion von Vorkonditionierungstechniken für dünnwandige Strukturen bei iterativen Gleichungslösern verzichtet. Über die direkten Gleichungslösemethoden wird in Kap. 4.3.1 ein Überblick gegeben.

4.2 Paralleles Matrix–Vektor–Produkt

Das Produkt

$$\mathbf{f} = \mathbf{A} \mathbf{d} \quad (4.2)$$

einer quadratischen dünnbesetzten Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ und eines Vektors $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^N$ soll verteilt mit N^P Prozessen ausgeführt werden. \mathbf{A} sei eine unsymmetrische Matrix, wobei davon ausgegangen werden soll, dass die Belegungsstruktur $S(\mathbf{A})$ mit von Null verschiedenen Werten symmetrisch ist. Jeder Prozess $K = 1, \dots, N^P$ hält nach Abb. 4.1 N^K Zeilen, so dass

$$N = \sum_{K=1}^{N^P} N^K . \quad (4.3)$$

Weiter sollen Indizes $i, j = 1, \dots, N$ globale (prozessübergreifende) Zeilen– und Spaltenindizes von \mathbf{A} bezeichnen, und \mathbf{i}^K sei ein Vektor der Länge N^K , der die globalen Zeilenindizes i derjenigen Zeilen enthält, die auf Prozess K gespeichert sind.

Mit $(\cdot)_l$, $l = 1, \dots, N^K$ werden lokale Zeilenindizes bezeichnet, so dass gilt:

$$i = i_l^K . \quad (4.4)$$

Derjenige Teil von A , der auf Prozess K gespeichert ist, wird mit A^K bezeichnet. A^K hat demnach N^K Zeilen und N Spalten. Die dünnbesetzte Matrix A^K enthält Einträge A_{ij}^{KK} , bei denen sowohl i als auch j Zeilen von A^K sind, für die demnach gilt

$$i = i_{l_1}^K, \quad j = i_{l_2}^K, \quad l_1, l_2 \in \{1, \dots, N^K\}, \quad (4.5)$$

und Einträge A_{ij}^{KP} , bei denen Zeile i auf Prozess K und Zeile j auf Prozess P gespeichert ist:

$$i = i_{l_3}^K, \quad j = i_{l_4}^P, \quad l_3 \in \{1, \dots, N^K\}, \quad l_4 \in \{1, \dots, N^P\}. \quad (4.6)$$

Hier erfolgt die Sortierung der Zeilen auf jedem Prozess beginnend mit N_I^K Zeilen, die ausschließlich Einträge A_{ij}^{KK} enthalten, gefolgt von N_I^K Zeilen, in denen auch Einträge A_{ij}^{KP} vorkommen. Die Gesamtanzahl an Zeilen des Prozesses K ist dann $N_I^K + N_I^K = N^K$.

Anmerkung: Dies ist natürlich nur eine von möglichen Sortierungen. Sie besitzt den Vorteil, dass die 'kommunikationsbehafteten' Zeilen explizit bekannt sind und die 'kommunikationsfreien' Zeilen aufeinanderfolgend sind. Dies bringt Vorteile bei der Umsetzung von Gebietszerlegungsmethoden nach Kap. 4.5 mit sich. Der enthaltene Nachteil ist, dass die resultierende Bandbreite der Matrix nicht optimal ist.

Die Vektoren d und f in Gl. (4.2) bestehen aus Teilvektoren d^K und f^K der Längen N^K , so dass deren Zeilennummerierung und Verteilung über die Prozesse derjenigen von A entspricht. Abb. 4.1 zeigt das Produkt Gl. (4.2) mit einer exemplarischen Belegung ausführlich.

Prozess													
1	f^1	A_{11}^{11}	A_{12}^{11}	0	0	0	0	0	\dots	0	0	d_I^1	$\left[\begin{array}{c} N_I^1 \\ N_I^1 \end{array} \right] N^1$
		A_{21}^{11}	A_{22}^{11}	0	A_{24}^{12}	0	A_{26}^{13}	0	\dots	0	A_{2N}^{1P}		
2	f^2	0	0	A_{33}^{22}	A_{34}^{22}	0	0	0	\dots	0	0	d_I^2	$\left[\begin{array}{c} N_I^2 \\ N_I^2 \end{array} \right] N^1$
		0	A_{42}^{21}	A_{43}^{22}	A_{44}^{22}	0	A_{46}^{23}	0	\dots	0	A_{4N}^{2P}		
3	f^3	0	0	0	0	A_{55}^{33}	A_{56}^{33}	0	\dots	0	0	d_I^3	$\left[\begin{array}{c} N_I^3 \\ N_I^3 \end{array} \right] N^1$
		0	A_{62}^{31}	0	A_{64}^{32}	A_{65}^{33}	A_{66}^{33}	0	\dots	0	A_{6N}^{3P}		
\vdots	\vdots							\ddots			\vdots		
N^P	f^{N^P}	0	0	0	0	0	0	0	\dots	$A_{(N-1)(N-1)}^{N^P N^P}$	$A_{(N-1)N}^{N^P N^P}$	$d_I^{N^P}$	$\left[\begin{array}{c} N_I^{N^P} \\ N_I^{N^P} \end{array} \right] N^1$
		0	$A_{N2}^{N^P 1}$	0	$A_{N3}^{N^P 2}$	0	$A_{N5}^{N^P 3}$	0	\dots	$A_{N(N-1)}^{N^P N^P}$	$A_{NN}^{N^P N^P}$		

Abb. 4.1: exemplarische Zeilensortierung für ein paralleles Matrix-Vektor-Produkt

Das Matrix-Vektor-Produkt lässt sich nun in drei Phasen aufteilen. Zuerst kommuniziert ein Prozess K seinen Teil-Vektor d_I^K der Länge N_I^K an den Prozess P , sofern dieser in A^P Einträge A_{ij}^{PK} enthält. Die Dauer dieser Kommunikation kann mit MPI mit der zweiten Phase überlagert

werden, wenn das Versenden von \mathbf{d}_l^K vor Beginn der zweiten Phase beginnt. In der zweiten Phase werden alle Multiplikationen

$$f_i^K = \sum_{j=1}^N A_{ij}^{KK} d_j^K \quad , \quad i = i_l^K \quad , \quad l = 1, \dots, N^K \quad , \quad K = 1, \dots, N^P \quad (4.7)$$

ausgeführt, da diese ohne Kommunikation unter den Prozessen möglich sind.

Der Empfang von \mathbf{d}_l^K als $\mathbf{d}^{P \leftarrow K}$ durch Prozess P und die Multiplikationen

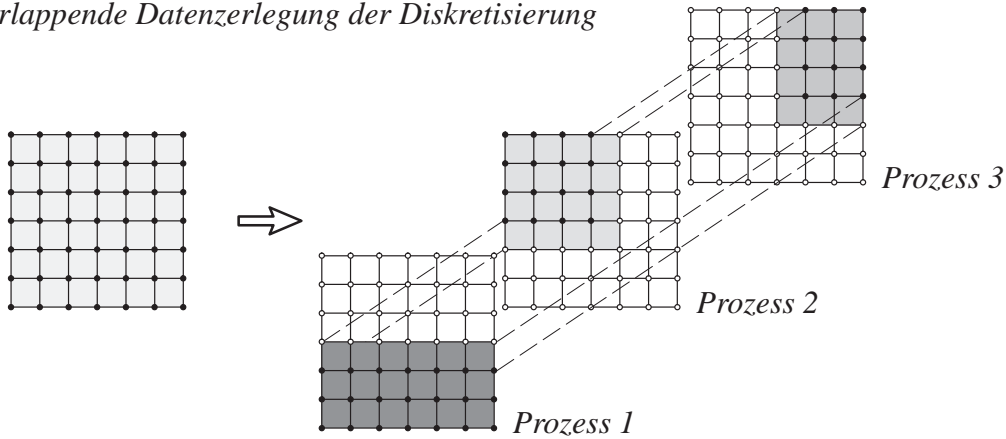
$$f_i^P \leftarrow f_i^P + \sum_{j=1}^N A_{ij}^{PK} d_j^{P \leftarrow K} \quad , \quad i = i_l^P \quad , \quad l = N_l^P + 1, \dots, N^P \quad , \quad P, K = 1, \dots, N^P \quad (4.8)$$

folgen dann als letzte Phase. Der Vektor $\mathbf{d}^{P \leftarrow K}$ auf Prozess P hat die Länge N . In ihn werden alle zu empfangenden (Teil-)Vektoren $\mathbf{d}_l^{P \leftarrow K}$, $K = 1, \dots, N^P$, $K \neq P$ der Längen N_l^K entsprechend der globalen Zeilenindizierung i einsortiert.

Anmerkung: Der Vektor $\mathbf{d}^{P \leftarrow K}$ auf dem empfangenden Prozess P ist dünnbesetzt. In einer Implementierung wird er daher in einem Kompressionspeicherformat angelegt, das nur die von Null verschiedenen Einträge aufnimmt. In dieses Speicherformat, das hier nicht weiter beschrieben wird, werden von Prozess P die Werte des von Prozess K empfangenen Vektors $\mathbf{d}_l^{P \leftarrow K}$ einsortiert.

Handelt es sich bei der Matrix \mathbf{A} um eine Systemmatrix, die aus einer überlappenden Datenzerlegung einer Diskretisierung resultiert (exemplarisch für $N^P = 3$ in Abb. 4.2a)), so entspricht die Verteilung ihrer Zeilen der Verteilung von Knotenfreiheitsgraden dieser Diskretisierung über die Prozesse. Einträge A_{ij}^{KP} und A_{ji}^{PK} auf Prozess K und P resultieren aus Elementen der Diskretisierung im Überlappungsbereich von Teilgebieten auf Prozessen K und P . Im Matrix-Vektor-Produkt führen diese Einträge zu einer Kommunikationsnotwendigkeit zwischen Prozessen, die einen gemeinsamen Überlappungsbereich teilen. Abb. 4.2b) zeigt schematisch die zugehörige Belegungsstruktur von \mathbf{A} , Abb. 4.2c) den Anteil des Produkts, der kommunikationsfrei ausgeführt werden kann (Gl. (4.7)). Die Multiplikation der 'Interprozessor-Nebendiagonaleinträge' A_{ij}^{PK} mit den kommunizierten Werten $d_j^{P \leftarrow K}$ (Gl. (4.8)) ist in Abb. 4.2d) dargestellt.

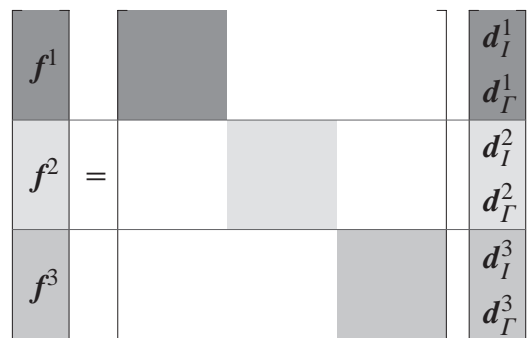
a) Überlappende Datenzerlegung der Diskretisierung



b) Belegung und Verteilung von A und d



c) lokale Multiplikation Gl. (4.7)



d) lokale Multiplikation Gl. (4.8) nach Kommunikation von $d_I^{P \leftarrow K}$ und $d_I^{K \leftarrow P}$

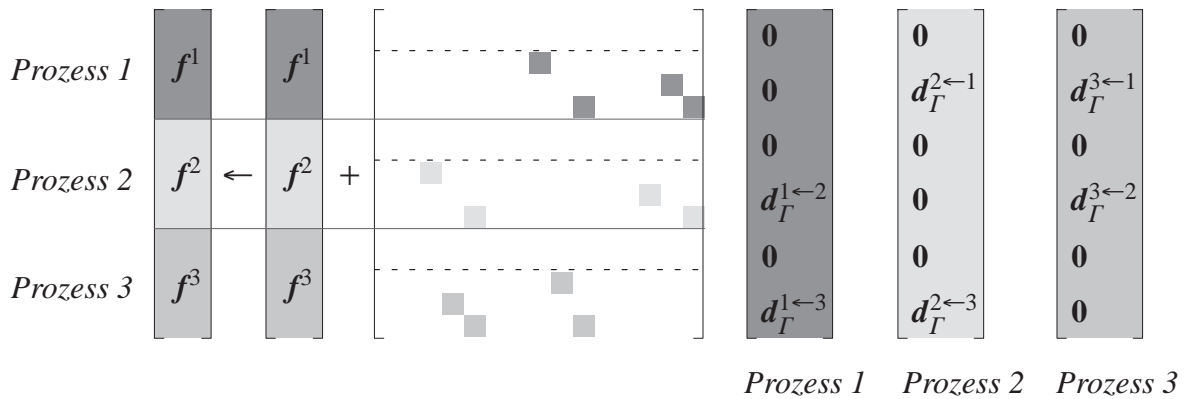


Abb. 4.2: Matrix-Vektor-Produkt und zugrundeliegende Datenzerlegung einer Diskretisierung auf $N^P = 3$ Prozessen

4.3 Parallele Lösung linearer Gleichungssysteme

Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme (LGS) der Form

$$A d = f, \quad A \in \mathbb{R}^{N \times N}, \quad d, f \in \mathbb{R}^N \quad (4.9)$$

werden in der Regel in direkte und iterative Lösungsmethoden unterschieden. Hierbei zählen zu den direkten Methoden diejenigen, bei denen der numerische Aufwand bei gegebener Be-

gungsstruktur und Dimension der Matrix A vorab bekannt ist. Der Archetyp der direkten Lösungsmethoden ist das *Gaussche Eliminationsverfahren*, siehe zum Beispiel Quarteroni et al. (2000). Neben diesem gehören zu den direkten Lösungsverfahren verschiedene Arten multiplikativer Zerlegungen (Faktorisierungen) von A . Der numerische Aufwand einer Faktorisierung wird im wesentlichen durch das spezifische Verfahren, die Größe sowie die Belegungsstruktur und Bandbreite der Koeffizientenmatrix bestimmt.

Die iterativen Methoden hingegen ermitteln von einer gegebenen Schätzung d^0 von d ausgehend eine Folge von Iterierten d^k , die gegen die Lösung d konvergiert. Der Lösungsprozess endet, wenn eine vom Anwender definierte Fehlerschranke erreicht ist. Der Aufwand hängt hierbei im wesentlichen von der Größe und Belegungsstruktur, der Qualität der Schätzung d^0 sowie der Konvergenzrate des Verfahrens ab, die wiederum wesentlich von den Charakteristika der Koeffizientenmatrix A beeinflusst wird. Als Archetyp iterativer Methoden kann die *Richardson-Iteration* angesehen werden (Hackbusch (1993)).

Die Klassifizierung in direkte und iterative Lösungsmethoden ist im allgemeinen wenig präzise. So ist es bei jüngeren Lösungsansätzen längst zu einer Durchmischung iterativer und direkter Methoden gekommen (Li und Demmel (1999)).

Bei vielen Implementierungen direkter Lösungsmethoden ist die Möglichkeit der iterativen Verbesserung (iterative refinement) der Lösung gegeben, um während des Lösungsvorgangs entstandene Rundungsfehler aus der Lösung zu eliminieren. Diese lässt sich formal als Richardson Iteration mit einer direkten Lösungsmethode als Vorkonditionierung beschreiben (Quarteroni et al. (2000), Li und Demmel (1999)).

Andersherum werden iterative Methoden zur Konvergenzbeschleunigung in der Regel vorkonditioniert, wozu häufig die direkte Lösung eines dem ursprünglichen Gleichungssystem ähnlichen herangezogen wird.

Im folgenden wird ein kurzer Überblick über gängige Lösungsmethoden gegeben, wobei im Besonderen auf die parallele Umsetzbarkeit der einzelnen Algorithmen eingegangen wird.

4.3.1 Direkte Gleichungslösung

Direkte Lösungsmethoden basieren in der Regel auf einer multiplikativen Zerlegung der Matrix A in Matrixfaktoren. Ein wichtiger Vertreter dieser Gruppe von Gleichungslösern ist die sogenannte LU-Zerlegung. Sie erzeugt eine multiplikative Zerlegung

$$A = LU, \tag{4.10}$$

bei der L eine untere Dreiecksmatrix (nur von Null verschiedene Einträge unterhalb und auf der Hauptdiagonalen) und U eine obere Dreiecksmatrix (nur Nichtnulleinträge oberhalb und auf der Hauptdiagonalen) darstellt. Um diese Zerlegung durchzuführen, existieren eine Reihe unterschiedlicher Algorithmen. Der wohl bekannteste ist die sogenannte Croutsche LU-Faktorisie-

rung (Press et al. (1992), van Duin (1998)), deren Basisalgorithmus im Anhang A1 angegeben ist.

Für eine stabile Implementierung ist es jedoch zwingend erforderlich, eine Pivotisierungsstrategie in den Algorithmus zu integrieren. Tritt während des Faktorisierungsprozesses ein Hauptdiagonalelement (Pivotelement) U_{jj} auf, das einen Wert Null oder nahe bei Null annimmt, so wird durch Zeilentausch (partial pivoting) oder Zeilen- und Spaltentausch (full pivoting) ein neues Pivotelement U_{jj} bestimmt, um die Faktorisierung fortsetzen zu können. Dies passiert infolge von Rundungsfehlern und kommt im besonderen bei Matrizen mit schlechter Kondition vor. Existiert für das LGS Gl. (4.9) eine eindeutige Lösung \mathbf{d} , so findet sich durch Pivotisierung für jede Spalte von A ein solches Pivotelement.

Ist A eine dünnbesetzte Matrix mit Bandstruktur und wird die sogenannte Bandbreite mit b_A bezeichnet, so sind alle Einträge $A_{ij} = 0$ für $|i - j| > b_A$. Die Bandmatrix enthält dann neben der Hauptdiagonalen maximal $2b_A$ Nebendiagonalen. Diese Bandstruktur der Matrix bleibt bei einer LU-Faktorisierung in den Faktoren L und U erhalten. Für diesen Fall beziffern Golub und Van Loan (1986) die Anzahl Operationen der LU-Faktorisierung mit:

$$Nb_A + Nb_A^2 - \frac{1}{2}b_A^3 - \frac{1}{6}b_A^3, \quad b_A \ll N. \quad (4.11)$$

Dies ist äquivalent zur Anzahl Operationen einer Band-Gauss-Elimination (Hackbusch (1993), Golub und Van Loan (1986)) und deutlich weniger als die $N^3/3$ Operationen, die für die Faktorisierung einer vollbesetzten Matrix mit dieser Methode nötig sind. Während der Faktorisierung werden alle Nebendiagonaleinträge innerhalb der Bandbreite einer Spalte mit Werten $L_{ij}, U_{ij} \neq 0$ belegt. Dies bezeichnet man als *fill-in*, der in Abhängigkeit von b_A zu einem hohen Speicherbedarf für die Matrixfaktoren und zu Rechenoperationen nach Gl. (4.11) führt. Da eine Pivotisierung von Zeilen und/oder Spalten die ursprüngliche Bandstruktur stört, besteht eine der Hauptherausforderungen beim Entwurf schneller direkter Gleichungslöser darin, eine Pivotisierungsstrategie zu wählen, die einen stabilen Fortschritt der Faktorisierung gewährleistet und dabei die ursprüngliche Bandbreite der Matrix möglichst wenig aufweitet.

Nach erfolgter Faktorisierung wird das LGS dann in zwei Schritten gelöst. Zuerst wird

$$L\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{f} \quad (4.12)$$

und anschließend

$$U\mathbf{d} = \hat{\mathbf{d}} \quad (4.13)$$

gelöst. Beide Algorithmen finden sich in Anhang A1.

Neben der LU-Faktorisierung existieren eine Reihe weiterer multiplikativer Zerlegungen. Dies sind im einzelnen die LDU-Faktorisierung für unsymmetrische Matrizen, sowie die LDL^T-Faktorisierung und die LL^T-Faktorisierung (die auch Cholesky-Faktorisierung genannt wird) für

positiv definite symmetrische Matrizen. Für eine Beschreibung dieser Algorithmen sowie eine Analyse der benötigten Anzahlen an Operationen soll hier jedoch nur auf die Literatur verwiesen werden (Bathe (2002), Golub und Van Loan (1986), Quarteroni et al. (2000), Press et al. (1992), Hackbusch (1993), van Duin (1998)).

4.3.2 Parallele direkte Gleichungslösung

Während parallele Faktorisierungsalgorithmen für dichtbesetzte Matrizen für Mehrprozessorrechner mit gemeinsamem Arbeitsspeicher (shared memory) schon eine Weile existieren, waren laut Duff und van der Vorst (1999) die ersten Versuche der Parallelisierung von Faktorisierungen dünnbesetzter, großer Matrizen bei verteiltem Arbeitsspeicher (distributed memory) eher wenig effizient.

Mittlerweile gibt es jedoch eine Reihe an parallelen direkten Lösern, die auch auf Mehrprozessorrechnern mit verteiltem Arbeitsspeicher hohe Lösungsgeschwindigkeiten erzielen. Zu nennen wären hier neben anderen 'SPOOLES' von Ashcraft et al. (1999), 'MUMPS' von Amestoy et al. (2003) sowie 'SuperLU_Dist' von Li und Demmel (1999). Einen Überblick über die Entwicklungen im Bereich der Parallelisierung direkter Lösungsmethoden liefern Duff und van der Vorst (1999).

Der entscheidende Vorteil und das Hauptanwendungsgebiet dieser direkten Lösungsverfahren liegt bei linearen Gleichungssystemen mit einer sehr schlechten Kondition, da sie verhältnismäßig unempfindlich gegenüber der Konditionierung der Koeffizientenmatrix sind, sofern sie eine iterative Verbesserung der Lösung vorsehen. So zeigen Li und Demmel (1999) Beispiele mit Matrizen mit Konditionszahlen $c(A) \leq 1 \cdot 10^{17}$ mit ihrem Gleichungslöser 'SuperLU_Dist'.

Der Nachteil der direkten Methoden ist die im Vergleich zu den iterativen Methoden (Kap. 4.3.3) geringe erzielbare Beschleunigung (speed-up) durch Parallelisierung, wenn die Gleichungslösung auf verhältnismäßig viele Prozesse aufgeteilt werden soll. Aus den in Amestoy et al. (2001) und (2003) beschriebenen numerischen Beispielen mit deren Löserbibliothek 'MUMPS' geht hervor, dass sich bei konstant gehaltener Matrixgröße eine ungefähre Halbierung der Lösungszeit bei einer Verdoppelung der Anzahl der Prozesse nur bis zu einer Anzahl von vier bis acht Prozessen erzielen lässt. Bei mehr beteiligten Prozessen fällt der Zeitgewinn deutlich niedriger aus. Ab 32 Prozessen kann durch Hinzunahme weiterer Prozesse kein Zeitgewinn mehr gezeigt werden.

Abb. 4.3 zeigt absolute Zeiten für die Lösung eines LGS mit dem Gleichungslöser 'SPOOLES' mit iterativer Verbesserung in Abhängigkeit von der Anzahl der beteiligten Prozesse. Das Gleichungssystem 'Rohr25980' resultiert aus einer Berechnung eines Rohres mit hybriden Finiten Elementen der 7-Parameter-Schalenformulierung. Es handelt sich hierbei um das Gleichungssystem des Beispiels in Kap. 6.6.1. Es hat $N = 149\,808$ Unbekannte und $N^{nz} = 6\,949\,728$ von

Null verschiedene Einträge. Es kann davon ausgegangen werden, dass es sich um ein ausgesprochen schlecht konditioniertes Gleichungssystem handelt. Stabilitätsprobleme bei der Faktorisierung traten jedoch nicht auf. Die angegebenen Zeiten wurden auf einem Mehrprozessorrechner NEC Express5800/1160Xa mit Intel-Itanium1-800MHz Prozessoren gemessen. In Abb. 4.3 ist gut erkennbar, dass die parallele Beschleunigung für höhere Anzahlen an beteiligten Prozessen deutlich hinter dem theoretischen Optimum zurückbleibt. Diese Beobachtung deckt sich gut mit den Angaben von Amestoy et al. (2001) und (2003) für deren Gleichungslöser 'MUMPS' für andere Beispiele vergleichbarer Größe.

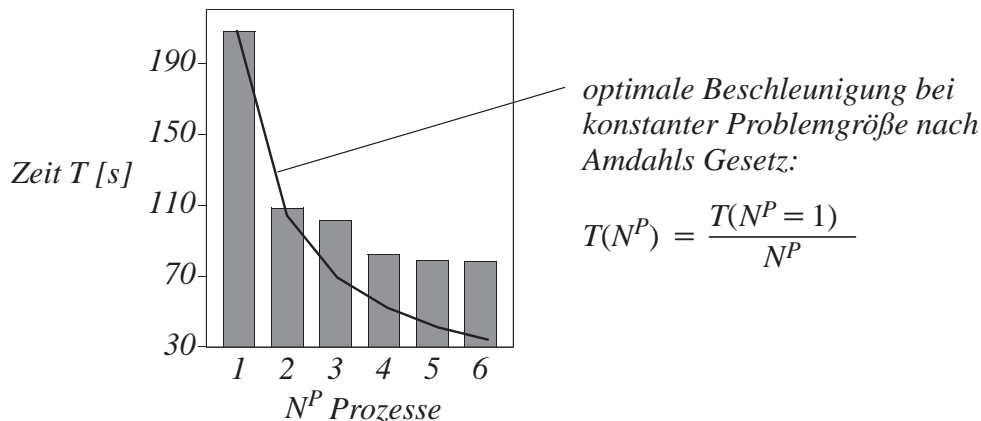


Abb. 4.3: Skalierung der Löserzeit von 'SPOOLES' für Gleichungssystem 'Rohrkreuzung' bei unterschiedlicher Prozessanzahl

Die parallelen direkten Lösungsmethoden stellen vor allem im Hinblick auf sehr schlecht konditionierte Gleichungssysteme eine Alternative dar, mit der auch verhältnismäßig große Probleme in vertretbarer Zeit gelöst werden können. Die erzielbare parallele Beschleunigung hinkt jedoch zumindest derzeit derjenigen der iterativen Verfahren hinterher. Dies ist neben der – unter gewissen Umständen – wesentlich höheren Geschwindigkeit der iterativen Gleichungslöser eine Motivation dafür, auch im Falle von schlecht konditionierten Gleichungssystemen iterative Methoden einsetzen zu wollen.

4.3.3 Iterative Gleichungslösung

Als ein Beispiel für ein Iterationsverfahren zur Lösung eines linearen Gleichungssystems (Gl. (4.9)) wurde bereits die *Richardson-Iteration* erwähnt. Bei dieser wird ausgehend von einer Schätzung d^0 die Lösung in einer Folge von Iterierten d^k durch

$$d^{k+1} = d^k + \tilde{I} (f - Ad^k), \quad (4.14)$$

beziehungsweise

$$d^{k+1} = (I - \tilde{I}A)d^k + \tilde{I}f \quad (4.15)$$

angenähert. $\tilde{\mathbf{I}}$ ist hierin eine Einheitsmatrix, die formal die Konsistenz der physikalischen Einheiten gewährleistet. Die Lösung \mathbf{d} des LGS gilt als hinreichend gut approximiert, wenn ein vom Anwender definiertes Konvergenzkriterium erfüllt ist.

Die Vektoren

$$\mathbf{r}^k = (\mathbf{f} - \mathbf{A}\mathbf{d}^k) \quad , \quad \mathbf{e}^k = \mathbf{d} - \mathbf{d}^k \quad (4.16)$$

werden als Residuum beziehungsweise Fehler im Iterationsschritt k bezeichnet.

Die Iteration konvergiert, wenn und nur wenn der Spektralradius ρ der Matrix $(\mathbf{I} - \mathbf{A})$ in Gl. (4.15) kleiner ist als Eins. Die Konvergenzgeschwindigkeit der Richardson-Iteration kann verbessert werden, indem man das LGS von links mit der Inversen \mathbf{M}^{-1} einer symmetrischen Matrix vormultipliziert:

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{f} \quad . \quad (4.17)$$

Die Iterationsvorschrift der vorkonditionierten Richardson-Iteration lautet dann

$$\mathbf{d}^{k+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A})\mathbf{d}^k + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{f} \quad , \quad (4.18)$$

beziehungsweise:

$$\mathbf{d}^{k+1} = \mathbf{d}^k + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}^k \quad . \quad (4.19)$$

\mathbf{M}^{-1} wird als Vorkonditionierungsmatrix bezeichnet, auf die im folgenden noch näher eingegangen wird.

Anmerkung 1: Neben der genannten Vorkonditionierung des LGS mittels einer Multiplikation des LGS mit \mathbf{M}^{-1} von links existiert noch die Möglichkeit einer beidseitigen Vorkonditionierung mit zwei Vorkonditionierungsmatrizen \mathbf{M}_{links}^{-1} und \mathbf{M}_{rechts}^{-1}

$$\mathbf{M}_{links}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{M}_{rechts}^{-1} \hat{\mathbf{d}} = \mathbf{M}_{links}^{-1} \mathbf{f} \quad ; \quad \mathbf{d} = \mathbf{M}_{rechts}^{-1} \hat{\mathbf{d}} \quad ,$$

sowie eine Vorkonditionierung von rechts

$$\mathbf{A} \mathbf{M}_{rechts}^{-1} \hat{\mathbf{d}} = \mathbf{f} \quad ; \quad \mathbf{d} = \mathbf{M}_{rechts}^{-1} \hat{\mathbf{d}} \quad .$$

Anmerkung 2: Es gibt in der Literatur keine Einigkeit, ob \mathbf{M} oder deren Inverse \mathbf{M}^{-1} als Vorkonditionierungsmatrix bezeichnet wird. In dieser Arbeit wird der Begriff Vorkonditionierungsmatrix für die Inverse \mathbf{M}^{-1} verwendet.

Zusätzlich kann ein skalarer Relaxationsparameter ω_k in die Iterationsvorschrift Gl. (4.18) eingeführt werden. Es ergibt sich

$$\mathbf{d}^{k+1} = (\mathbf{I} - \omega_k \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A})\mathbf{d}^k + \omega_k \mathbf{M}^{-1}\mathbf{f} \quad , \quad (4.20)$$

beziehungsweise

$$\mathbf{d}^{k+1} = \mathbf{d}^k + \omega_k \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r} \quad . \quad (4.21)$$

Der Klammerausdruck in Gl. (4.20) wird als Iterationsmatrix

$$\mathbf{G}(\omega_k, \mathbf{M}^{-1}) = (\mathbf{I} - \omega_k \mathbf{M}^{-1} \mathbf{A}) \quad (4.22)$$

bezeichnet. Je nachdem, ob \mathbf{G} vom Iterationsschritt k unabhängig oder abhängig ist, unterscheidet man in eine stationäre oder instationäre Richardson Iteration.

Eine Konvergenz der Iterationsvorschrift ist garantiert, wenn und nur wenn $\rho(\mathbf{G}) < 1$.

Abhängig von der Wahl der Vorkonditionierung und des Relaxationsparameters ergeben sich Varianten der Richardson-Iteration, die zum Teil als eigene Iterationsverfahren bekannt sind. Einige Beispiele für solche Iterationsverfahren sind:

- Direkte Lösung mit iterativer Verbesserung (siehe auch Kap. 4.3.1):

$$\mathbf{M}_{LU}^{-1} = (\mathbf{LU})^{-1} \quad ; \quad \omega = 1 = \text{konstant} \quad (4.23)$$

Wird eine Faktorisierung $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ im Rahmen endlicher Genauigkeit ausgeführt, kumulieren sich Rundungsfehler in den Matrixfaktoren. Zum Teil wird zur Vermeidung von Bandbreite-störender Pivotisierung absichtlich ein fehlerbehaftetes Pivotelement eingebracht. Verwendet man diese fehlerbehafteten Matrixfaktoren im Rahmen einer Richardson Iteration, so wird dies als iterative Verbesserung (iterative refinement) eines direkten Lösungsverfahrens bezeichnet. In der Regel sind nur sehr wenige Iterationen notwendig, um eine hohe Genauigkeit der Lösung zu erzielen, da die Vorkonditionierung der Inversen $\mathbf{M}^{-1} \approx \mathbf{A}^{-1}$ sehr nahe kommt.

- Jacobi-Iteration (Anhang A2.1):

$$\mathbf{M}_J^{-1} = \mathbf{D}^{-1} = (\text{diag}(\mathbf{A}))^{-1} \quad ; \quad \omega = 1 = \text{konstant} \quad (4.24)$$

- Gauss-Seidel-Iteration (Anhang A2.2):

$$\mathbf{M}_{GS}^{-1} = (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1} \quad ; \quad \omega = 1 = \text{konstant} \quad (4.25)$$

Hierin ist $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{A})$ und \mathbf{L} der streng untere Dreieckanteil von \mathbf{A} .

- Symmetrische-Gauss-Seidel-Iteration (Anhang A2.3):

$$\mathbf{M}_{SGS}^{-1} = (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1} \mathbf{D} (\mathbf{D} + \mathbf{U})^{-1} \quad ; \quad \omega = 1 = \text{konstant} \quad (4.26)$$

Hierin ist \mathbf{D} die Diagonale und \mathbf{L} und \mathbf{U} sind der streng untere beziehungsweise streng obere Dreieckanteil von \mathbf{A} .

- Blockvarianten der Iterationsverfahren

Die bisher genannten Iterationsverfahren werden auch als sogenannte punktweise Methoden bezeichnet. Koeffizientenmatrizen, die auf einer Diskretisierung mit Finiten Elementen beruhen, haben jedoch eine Blockstruktur, wenn jeweils die N^{dof} Unbekannten eines Knotens zusammengefasst werden. Eine solche Blockmatrix

$A^{M \times M}$ hat Blockdimensionen $M \times M$ aus Blöcken A_{ij} $i, j = 1, \dots, M$. Nebendiagonalblöcke sind dann $A_{ij} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ $i \neq j$, Hauptdiagonalblöcke $A_{ii} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sind quadratisch⁶. Die Blockstruktur kann bei der Konstruktion der Vorkonditionierung berücksichtigt werden. So lautet exemplarisch die Vorkonditionierungsmatrix der Block–Jacobi–Iteration:

$$M_{BJ}^{-1} = D^{-1} = (\text{blockdiag}(A))^{-1} \quad ; \quad \omega = I = \text{konstant} \quad . \quad (4.27)$$

An die Stelle der Invertierung der Hauptdiagonaleinträge A_{ii}^{-1} tritt somit die Invertierung der Hauptdiagonalblöcke $A_{ii}^{n \times n}$.

Eine Beschreibung weiterer Blockvarianten findet man bei Barrett et al. (2002) und Hackbusch (1993). Blockvarianten von Iterationsverfahren zeichnen sich durch eine effizientere Implementierbarkeit und durch unter Umständen verbesserte Konvergenzgeschwindigkeit aus.

- Relaxierte stationäre Iterationsverfahren

Von den erwähnten Jacobi und Gauss Seidel Verfahren existieren über– und unterrelaxierte Varianten, die mittels eines Relaxationsparameters $\omega_k \neq 1$, $\omega_k = \omega = \text{konstant}$ eine höhere Konvergenzgeschwindigkeit erzielen. Die Wahl eines optimalen Relaxationsparameters ist im allgemeinen aufwendig (Mok (2001), Quarteroni et al. (2000)) und wird hier nicht weiter behandelt.

Die bisher erwähnten stationären Iterationsverfahren verwenden einen konstanten Relaxationsparameter. Neben diesen gibt es die Gruppe der nichtlinearen und instationären Iterationsverfahren, die in jedem Schritt einen optimalen Relaxationsparameter ω_k und eine *Suchrichtung* \mathbf{p}^k ermitteln. Ein wichtiger Vertreter dieser Gruppe von Verfahren ist das konjugierte Gradientenverfahren (Conjugate Gradient method oder kurz CG–Verfahren) von Hestenes und Stiefel (1952). Gl. (4.21) kann man allgemeiner ausdrücken als

$$\mathbf{d}^{k+1} = \mathbf{d}^k + \omega_k \mathbf{p}^k \quad . \quad (4.28)$$

Führt man als Hilfsgröße das vorkonditionierte Residuum \mathbf{z}^k mit

$$\mathbf{z}^k = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r}^k \quad (4.29)$$

ein, so ermittelt sich der aktuelle Relaxationsparameter ω_k sowie die Suchrichtung \mathbf{p}^k beim CG–Verfahren (Gl. (A.11)) zu:

6. Bei Dirichlet–Randbedingungen einzelner Knotenfreiheitsgrade sind deren vorgeschriebene Lösungswerte bekannt. Es wird hier davon ausgegangen, dass solche Freiheitsgrade aus dem Gleichungssystem vorab eliminiert worden sind. Die Zeilen– und Spaltendimension der zu dem Knoten gehörenden Blockzeile und –spalte verringert sich um die Anzahl seiner Freiheitsgrade mit vorgeschriebenen Werten. Sind die Werte aller Freiheitsgrade eines Knotens als Randbedingung vorgeschrieben, entfällt die zugehörige Blockzeile und –spalte ganz.

$$\omega_k = \frac{(\mathbf{p}^k)^T \mathbf{r}^k}{(\mathbf{p}^k)^T \mathbf{A} \mathbf{p}^k} , \quad (4.30)_1$$

$$\mathbf{p}^k = \mathbf{z}^k - \frac{(\mathbf{z}^k)^T \mathbf{A} \mathbf{p}^{k-1}}{(\mathbf{p}^{k-1})^T \mathbf{A} \mathbf{p}^{k-1}} \mathbf{p}^{k-1} , \quad \mathbf{p}^0 = \mathbf{z}^0 . \quad (4.30)_2$$

Eine detaillierte Beschreibung des CG–Verfahrens findet sich beispielsweise in Quarteroni et al. (2000). Das vorkonditionierte CG–Verfahren konvergiert superlinear. Die Energienorm des Fehlers $\mathbf{e}^k = \mathbf{A} \mathbf{r}^k$ im Iterationsschritt k ist

$$\| \mathbf{e}^k \|_A \leq C_k \| \mathbf{e}^0 \|_A . \quad (4.31)$$

Hierin ist C_k der Konvergenzfaktor, für den gilt:

$$C_k \leq 2 \left[\frac{\sqrt{c(\mathbf{M}^{-1} \mathbf{A})} - 1}{\sqrt{c(\mathbf{M}^{-1} \mathbf{A})} + 1} \right]^k , \quad C_k \geq 0 \quad \forall k , \quad \lim_{k \rightarrow \infty} C_k = 0 . \quad (4.32)$$

Gl. (4.32) ist eine obere Schranke für den Konvergenzfaktor, die maßgeblich von der Konditionszahl c der vorkonditionierten Koeffizientenmatrix beeinflusst ist (van der Sluis und van der Vorst (1986)). Um sich die Eignung dieser Verfahren für eine parallele Umsetzung anzuschauen, wird hier stellvertretend für alle vorkonditionierten Iterationsverfahren das CG–Verfahren betrachtet. Das CG–Verfahren benötigt in der verwendeten Implementierung (Anhang A2.4, Gl. (A.12)) in einem Iterationsschritt k folgende grundlegende Operationen:

- Ein Matrix–Vektor–Produkt $\mathbf{q} = \mathbf{A} \mathbf{p}$
- Die Anwendung einer Vorkonditionierung auf einen Vektor $\mathbf{z} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r}$
- Zwei innere Produkte $\mathbf{r}^T \mathbf{z}$ und $\mathbf{p}^T \mathbf{q}$
- Drei Vektoradditionen $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{d} + \omega \mathbf{p}$, $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r} - \omega \mathbf{q}$ sowie $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{z} + \beta \mathbf{p}$

Zunächst benötigt man eine parallele Implementierung des in Gl. (4.30) enthaltenen Matrix–Vektor–Produktes, beispielweise wie in Kap. 4.2 beschrieben. Die inneren Produkte können mit wenig Kommunikation parallel ausgeführt werden, die Addition verteilter Vektoren kann kommunikationsfrei implementiert werden, sofern der skalare Faktor redundant auf allen Prozessen vorliegt. Die Aufmerksamkeit richtet sich somit auf eine parallele Umsetzung der Vorkonditionierung Gl. (4.29). Weitere parallele Implementierungsvarianten können Barrett et al. (2002) und Douglas et al. (2003) entnommen werden.

4.4 Basismethoden zur Vorkonditionierung

Drei Designkriterien existieren für eine parallele Vorkonditionierung:

- M^{-1} soll die Breite des Eigenwertspektrums von A reduzieren:

$$c(M^{-1} A) \ll c(A) \quad (4.33)$$

- Die Konstruktion von M^{-1} und deren Anwendung auf einen Vektor sollte möglichst preiswert sein
- Die Konstruktion und Anwendung von M^{-1} sollte gut parallelisierbar sein

Anmerkung: Die triviale Wahl $M^{-1} = A^{-1}$ stellt nach dem ersten genannten Designkriterium eine optimale Vorkonditionierung dar, die jedoch aufgrund des zweiten und dritten Kriteriums nicht sinnvoll ist.

Die theoretischen Grundlagen für den Entwurf optimaler Vorkonditionierungen sind derzeit noch nicht voll gegeben und die Konstruktion auch 'nur' guter Vorkonditionierungen alles andere als trivial (Quarteroni et al. (2000)). Es ist daher wie bereits erwähnt eine anerkannte und weit verbreitete 'Daumenregel', dass M^{-1} eine gute Vorkonditionierung ist, wenn $M^{-1}A$ der Einheitsmatrix I möglichst nahe kommt und das Spektrum der Eigenwerte von $M^{-1}A$ eng begrenzt ist. Aufgrund der numerischen Kosten der Vorkonditionierung (in der Konstruktion der Vorkonditionierungsmatrix, in der Anwendung der Vorkonditionierung auf einen Vektor und in Form von Speicherplatz), muss sie so konstruiert werden, dass die erzielte Konvergenzbeschleunigung diese Kosten amortisiert.

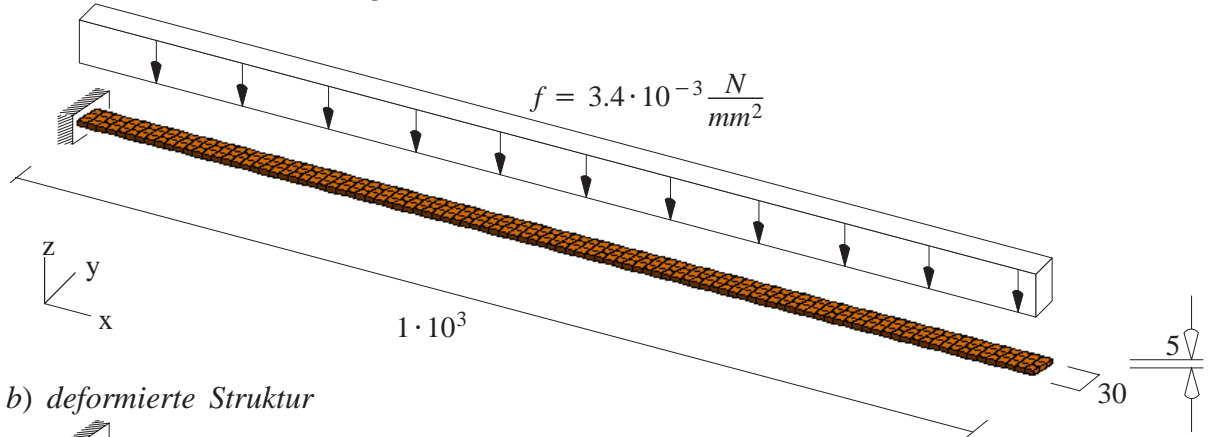
Im Falle der parallelen Vorkonditionierung muss zusätzlich zwischen der 'sequentiellen' Effizienz und der erzielbaren Beschleunigung durch Parallelisierung unterschieden werden. Viele der 'klassischen' Vorkonditionierungstechniken haben eine große sequentielle Komponente, die sich im Sinne von Amdahls Gesetz negativ auf die Beschleunigung durch Parallelisierung auswirkt. Einige gängige Basisvorkonditionierungsmethoden werden im Anhang A3 etwas näher erläutert.

4.4.1 Vergleich von Basisvorkonditionierungen anhand eines Schalenbeispiels

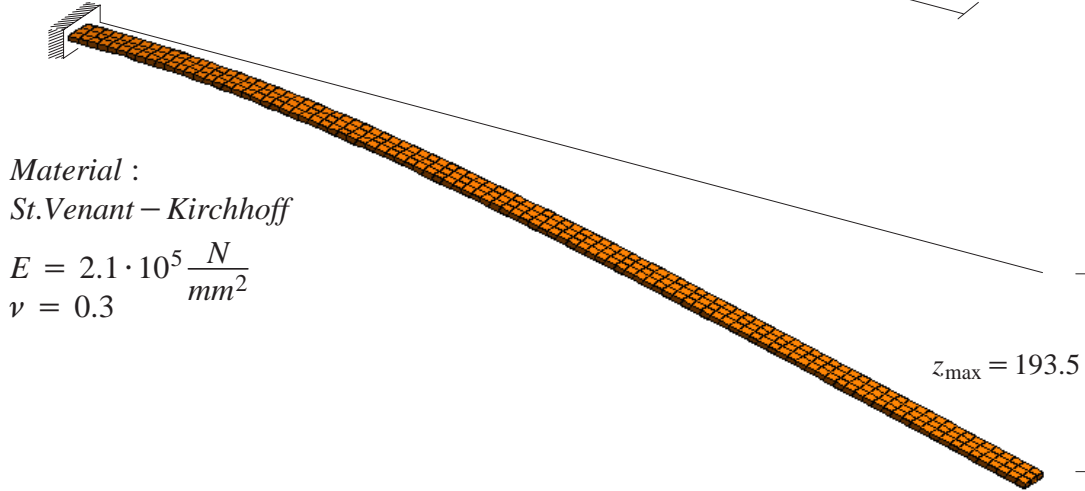
Zwei Basisverfahren der Vorkonditionierung werden anhand des in Abb. 4.4a) dargestellten Beispiels verglichen. Hierbei soll insbesondere die Eignung (bzw. Nichteignung) für Gleichungssysteme der 7-Parameter-Schalenformulierung an einem möglichst einfachen Beispiel untersucht werden. Es handelt sich dabei um einen Kragarm, der mit einer Flächenlast auf der Schalenmittelfläche belastet wird. Es wird ein St. Venant-Kirchhoff-Materialgesetz verwendet sowie eine Kinematik mit kleinen Verzerrungen angenommen. Die Deformation des Kragarms ist in Abb. 4.4b) dargestellt. Der Kragarm wird mit 100×3 bilinearen hybriden Elementen diskretisiert. Die Dickenänderung an der Einspannung ist nicht festgehalten. Das resultierende Gleichungssystem hat 2404 Unbekannte.

a) Geometrie und Belastung

[mm]



b) deformierte Struktur



Material :

St. Venant – Kirchhoff

$$E = 2.1 \cdot 10^5 \frac{N}{mm^2}$$

$$\nu = 0.3$$

$$z_{\max} = 193.5$$

Abb. 4.4: Kragarm unter Flächenlast

Die Basisverfahren zur Vorkonditionierung verhalten sich, wie aus der Literatur bekannt, in Abhängigkeit von der Fehlerart sehr unterschiedlich. Dieser Umstand wird hier für die aus der 7-Parameter Schalenformulierung resultierenden Gleichungssysteme näher untersucht. Es wird eine Startschätzung d^0 der Verschiebungen erzeugt, die einen vorab definierten Fehler enthält. Zu diesem Zweck werden Fehler

$$e_{v_3}(x_n, \lambda_w) = a_{v_3} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_w} x_n\right), \quad n = 1, \dots, N_{nd} \quad (4.34)$$

$$e_{w_1}(x_n, \lambda_w) = a_{w_1} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_w} x_n\right)$$

mit der Wellenlänge λ_w und der Amplitude a_{v_3} beziehungsweise a_{w_1} in Abhängigkeit der Knotenkoordinaten x_n eingeführt. Bei $e_{v_3}(x_n, \lambda_w)$ handelt sich um einen in der x-Achse sinusförmig verlaufenden diskreten Fehler, der jedoch nur auf die z-Komponente der Mittelflächenverschiebung v_3 aufgebracht wird. Analog ist $e_{w_1}(x_n, \lambda_w)$ nur in der x-Komponente der Differenzverschiebung der Schalenober- zur Schalenmittelfläche w_1 enthalten.

Anmerkung: Die Vorgabe eines Fehlers $\mathbf{e} = \mathbf{d}^0 - \mathbf{d}$ ist natürlich nur möglich, wenn die Lösung \mathbf{d} bekannt ist. Die Lösung wurde daher hier vorab mit Maschinengenauigkeit ermittelt. Alternativ hätte auch das homogene (unbelastete) Problem $\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}$ bei von Null verschiedener Startschätzung $\mathbf{d}^0 = \mathbf{e}$ betrachtet werden können.

Die Fehleramplituden werden zu

$$\begin{aligned} a_{v_3} &= \frac{1}{5} \max_n(v_3^n) = 38.7 \text{ mm} \\ a_{w_1} &= \max_n(w_1^n) = 0.64 \text{ mm} \end{aligned}, \quad n = 1, \dots, N_{nd} \quad , \quad (4.35)$$

gewählt. Die Knotenfehlervektoren \mathbf{e}_{v_3} und \mathbf{e}_{w_1} der Dimension N sind dann:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{v_3}^T(\lambda_w) &= \left[0 \ 0 \ e_{v_3}(x_1, \lambda_w) \ 0 \ 0 \ 0, \dots, 0 \ 0 \ e_{v_3}(x_n, \lambda_w) \ 0 \ 0 \ 0, \dots \right] \\ \mathbf{e}_{w_1}^T(\lambda_w) &= \left[0 \ 0 \ 0 \ e_{w_1}(x_1, \lambda_w) \ 0 \ 0, \dots, 0 \ 0 \ 0 \ e_{w_1}(x_n, \lambda_w) \ 0 \ 0, \dots \right] \end{aligned}, \quad n = 1, \dots, N_{nd} \quad (4.36)$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{\text{Freiheitsgrade des Knoten 1}} \quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\text{Freiheitsgrade des Knoten } n}$

Vier verschiedene Startschätzungen \mathbf{d}^0 werden verwendet. Es wird jeweils ein langwelliger und ein kurzweiliger Fehler in der z-Mittelflächenverschiebungs- und der x-Differenzverschiebungskomponente betrachtet:

$$\mathbf{d}_{v_3, kurz}^0 = \mathbf{d} + \mathbf{e}_{v_3}(\lambda_w = 5 \cdot 10^1), \quad (4.37)$$

$$\mathbf{d}_{w_1, kurz}^0 = \mathbf{d} + \mathbf{e}_{w_1}(\lambda_w = 5 \cdot 10^1), \quad (4.38)$$

$$\mathbf{d}_{v_3, lang}^0 = \mathbf{d} + \mathbf{e}_{v_3}(\lambda_w = 2 \cdot 10^3), \quad (4.39)$$

$$\mathbf{d}_{w_1, lang}^0 = \mathbf{d} + \mathbf{e}_{w_1}(\lambda_w = 2 \cdot 10^3). \quad (4.40)$$

Abb. 4.5a) zeigt die Lösung \mathbf{d} , die Startschätzungen \mathbf{d}^0 sind in Abb. 4.5b)–4.5e) als Deformationen des Kragarms dargestellt. Die betrachteten Knotenfreiheitsgrade v_3 und w_1 sind beide an der auftretenden Biegedeformation beteiligt und über die Krümmungen und Querschubverzerrungen gekoppelt. Obwohl in den verwendeten Startvektoren $\mathbf{d}_{v_3, lang/ kurz}^0$ beziehungsweise $\mathbf{d}_{w_1, lang/ kurz}^0$ jeweils nur ein Fehler in einem der beiden Freiheitsgrade aufgebracht wird, und in dem anderen Freiheitsgrad die Lösung gegeben ist, bleibt diese nicht erhalten. Es entstehen Fehler e_{v_3} beziehungsweise e_{w_1} infolge eines eingebrachten Fehlers $e_{w_1}(x_k, \lambda_w)$ beziehungsweise $e_{v_3}(x_k, \lambda_w)$. Die angewendeten Vorkonditionierungsmethoden sind:

- p -Schritt symmetrische Gauss Seidel-Vorkonditionierung (SGS(p)) mit $p = 5, 20, 100$, wie in Anhang A3.2 beschrieben
- Unvollständige Faktorisierungs-Vorkonditionierung (ILU(p)) mit $p = 0, 1$, wie in Anhang A3.3 beschrieben

a) Lösung



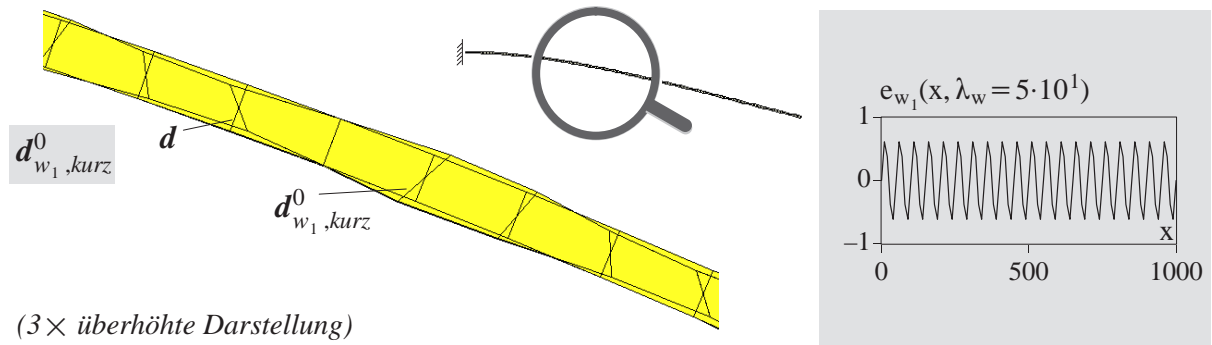
b) Startschätzung mit kurzwelligem Fehler in z -Mittelflächenverschiebung



c) Startschätzung mit langwelligem Fehler in z -Mittelflächenverschiebung

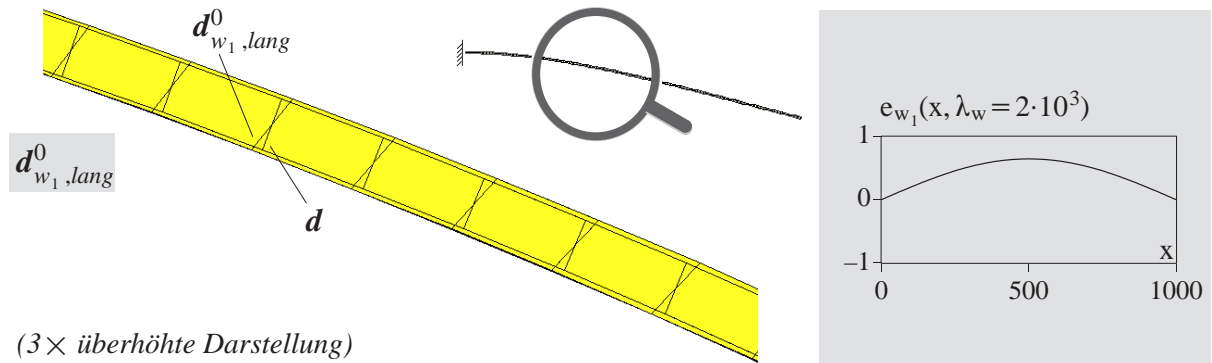


d) Startschätzung mit kurzwelligem Fehler in x -Differenzverschiebung



(3× überhöhte Darstellung)

e) Startschätzung mit langwelligem Fehler in x -Differenzverschiebung



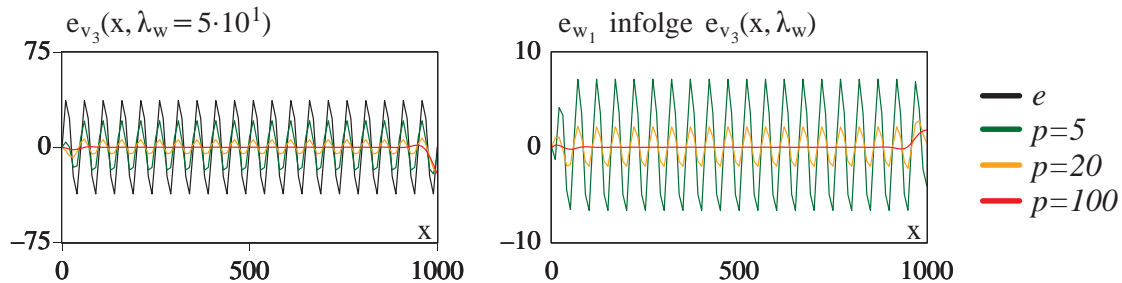
(3× überhöhte Darstellung)

Abb. 4.5: fehlerbehaftete Startschätzungen d^0 als Deformationen des Kragarms

Zusätzlich wird vor der Anwendung der Vorkonditionierung eine symmetrische Skalierung des Gleichungssystems (Kap. A3.1, Gl. (A.14)) vorgenommen.

In den Abbildungen 4.6 – 4.9 ist auf der linken Seite jeweils der Fehler e_{v_3} im Freiheitsgrad v_3 , auf der rechten Seite der Fehler e_{w_1} im Freiheitsgrad w_1 aufgetragen.

a) p -Schritt symmetrische Gauss–Seidel–Vorkonditionierung $SGS(p)$



b) unvollständige Faktorisierung–Vorkonditionierung $ILU(p)$

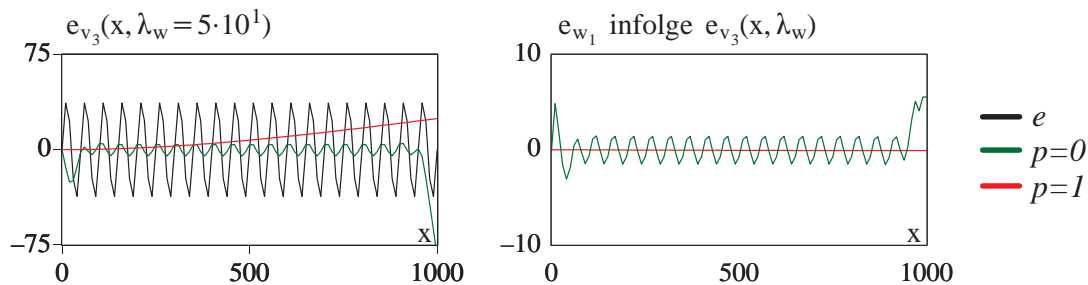
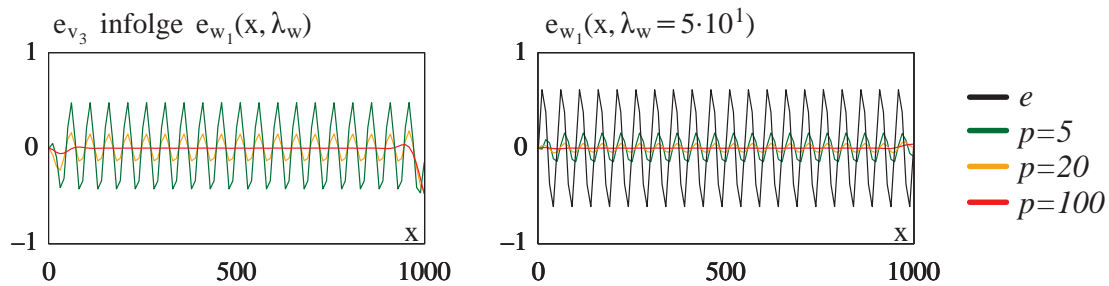


Abb. 4.6: kurzwelliger Fehler in z -Mittelflächenverschiebungen nach Abb. 4.5b)

a) p -Schritt symmetrische Gauss–Seidel–Vorkonditionierung $SGS(p)$



b) unvollständige Faktorisierung–Vorkonditionierung $ILU(p)$

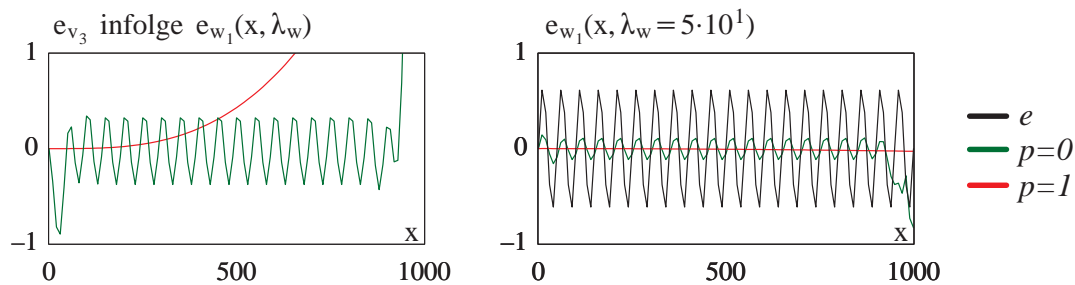


Abb. 4.7: kurzwelliger Fehler in x -Differenzverschiebungen nach Abb. 4.5d)

Für die Qualität der Vorkonditionierung ist neben der betragsmäßigen Reduktion des Fehlers vor allem die Fähigkeit zur Eliminierung kurzweiliger Fehleranteile von Bedeutung. Diese spielt im Hinblick auf die in Kap. 6 vorgestellte Multilevelvorkonditionierung eine bedeutende Rolle.

In Abb. 4.6 sind verbleibende Fehlerverläufe nach der Anwendung der Vorkonditionierungsverfahren für die Startschätzung $d_{v_3, kurz}^0$ dargestellt. Die SGS(p)–Vorkonditionierung (Abb. 4.6a)) reduziert den Fehler betragsmäßig deutlich, ein glatter verbleibender Fehlerverlauf wird jedoch erst annähernd bei $p = 100$ Iterationen erreicht. Die ILU(p)–Vorkonditionierung (Abb. 4.6b)) zeigt eine gute Fehlerreduktion mit $p = 0$ und erzielt mit $p = 1$ einen 'glatten' verbleibenden Fehler in v_3 sowie eine sehr gute Näherung der Lösung in w_1 .

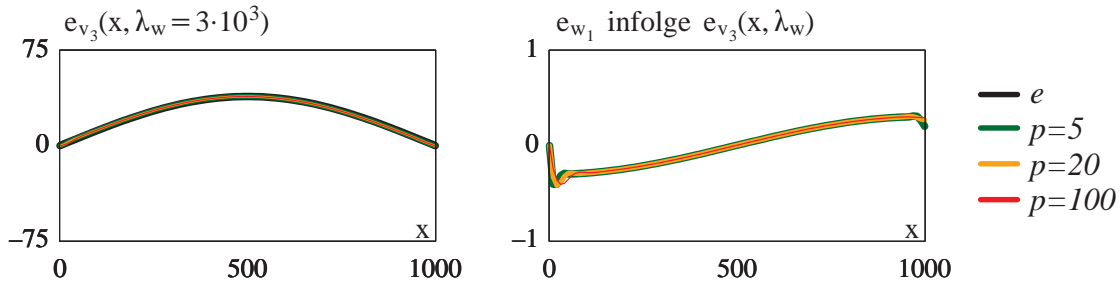
In Abb. 4.7 werden diese Vorkonditionierungen auf $d_{w_1, kurz}^0$ angewendet. Auch hier breitet sich der eingebrachte Fehler erwartungsgemäß in den Freiheitsgrad v_3 aus. Das Verhalten gleicht demjenigen aus Abb. 4.6. Aufgrund der Fehlerausbreitung scheint es von untergeordneter Bedeutung, in welchen Freiheitsgrad der Fehler initial eingebracht wurde.

Bei vorgegebenem langweiligen Fehler ist das Verhalten grundlegend anders. In Abb. 4.8 wird mit $d_{v_3, lang}^0$ ein langweiliger Fehler in der z–Mittelflächenverschiebung v_3 eingebracht. Auch hier breitet sich der Fehler erwartungsgemäß in den Freiheitsgrad w_1 hinein aus. Die betragsmäßige Fehlerreduktion ist in diesem Fall jedoch sowohl bei der SGS(p)–Vorkonditionierung (Abb. 4.8a)) als auch bei ILU(0)–Vorkonditionierung sehr schlecht. Lediglich die ILU(1)–Vorkonditionierung (Abb. 4.8b)) ist in der Lage den Fehler überzeugend zu reduzieren.

Wird der langweilige Fehler mittels $d_{w_1, lang}^0$ in der Differenzverschiebung w_1 eingebracht (Abb. 4.9), so ist auch hier die Fehlerausbreitung in den Knotenfreiheitsgrad v_3 hinein zu beobachten. Allen untersuchten Methoden gelingt es dabei problemlos, den Fehler in der Differenzverschiebung w_1 zu reduzieren. Der ausgebreitete Fehler im Knotenfreiheitsgrad v_3 wird hingegen wieder nur von der ILU(1)–Vorkonditionierung gut erfasst.

Fasst man die Ergebnisse für $d_{v_3, lang}^0$ und $d_{w_1, lang}^0$ in Abb. 4.8 und 4.9 zusammen, so lässt sich sagen, dass vor allem ein langweiliger Fehler in der Mittelflächenverschiebung v_3 den Vorkonditionierungsmethoden 'Probleme bereitet'. Die einzige Vorkonditionierung, die diese Fehlerart hier gut reduziert ist die ILU(1)–Vorkonditionierung.

a) p -Schritt symmetrische Gauss–Seidel–Vorkonditionierung SGS(p)



b) unvollständige Faktorisierung–Vorkonditionierung ILU(p)

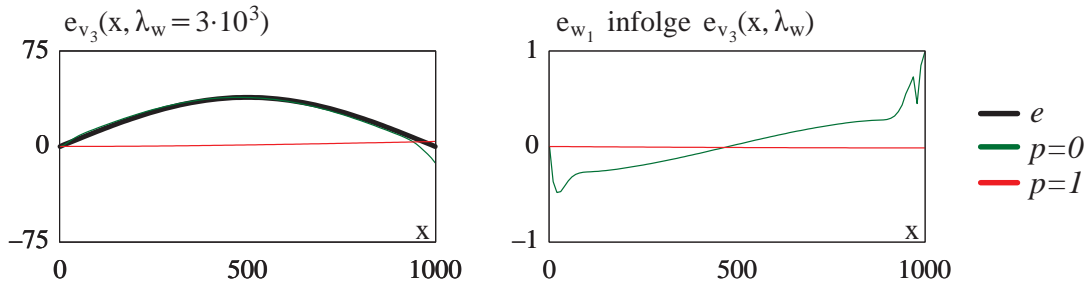
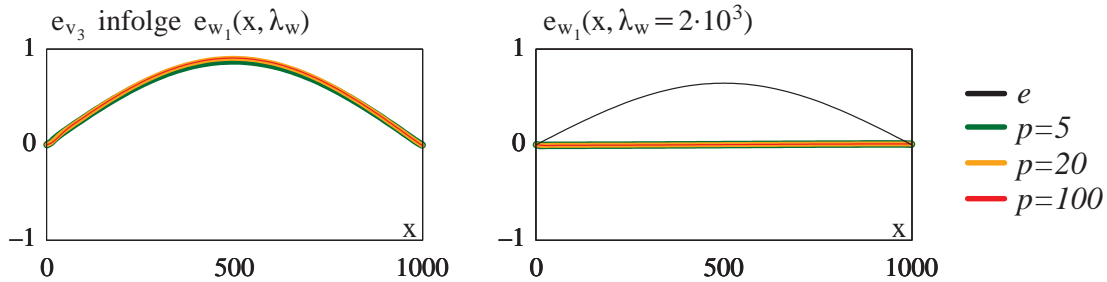


Abb. 4.8: langwelliger Fehler in z -Mittelflächenverschiebungen nach Abb. 4.5c)

a) p -Schritt symmetrische Gauss–Seidel–Vorkonditionierung SGS(p)



b) unvollständige Faktorisierung–Vorkonditionierung ILU(p)

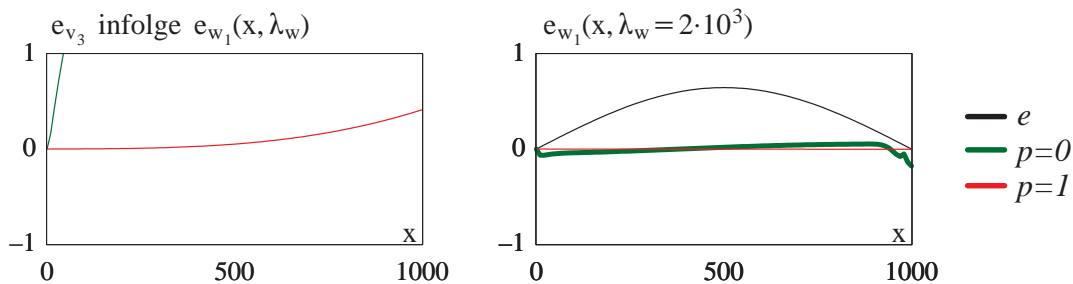


Abb. 4.9: langwelliger Fehler in x -Differenzverschiebungen nach Abb. 4.5e)

Kurzweilige Fehler in den Differenz- als auch in den Mittelflächenverschiebungen sowie langwellige Fehler in der Differenzverschiebung werden gut erfasst. Die symmetrische Gauss Seidel–Vorkonditionierung glättet kurzweilige Fehleranteile, ist jedoch kaum in der Lage, langwellige Fehler zu reduzieren. Dieses Verhalten ist aus der Literatur bekannt und tritt in dieser Form bei allen Vorkonditionierungen auf der Basis additiver Zerlegung der Koeffizientenmatrix auf (Jacobi- und Gauss Seidel- verwandte Vorkonditionierungen). Aus diesem Grund werden sie

auch als Glätter bezeichnet. Ein verbessertes Verhalten kann für Blockvarianten dieser Methoden erwartet werden, welche im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht untersucht wurden.

Die ILU(p)-Vorkonditionierung zeigt für $p > 0$ neben guten Glättungseigenschaften auch eine verhältnismäßig gute betragsmäßige Reduktion langwelliger Fehler.

In diesem Vergleich wurden die numerischen Kosten der einzelnen Vorkonditionierungsmethoden nicht betrachtet, obwohl sie natürlich eine wichtige Rolle spielen. Die Angabe von Vorkonditionierungszeiten hat hier jedoch aus zwei Gründen nur geringe Aussagekraft. Zum einen Verhalten sich die ILU(p)-Vorkonditionierungskosten nicht linear mit der Größe des Problems, so dass die bei diesem kleinen Beispiel ermittelten Zeiten nicht übertragbar sind. Zum anderen sind die Vorkonditionierungskosten nicht unabhängig von der erzielten Verbesserung des Konvergenzfaktors Gl. (4.31) zu sehen. Diese wird jedoch auch maßgeblich von der Kondition der Koeffizientenmatrix beeinflusst (siehe auch Kap. 4.3.3, Gl. (4.31) und (4.32)) und ist damit spielabhängig.

4.5 Überlappende Gebietszerlegungsmethoden als Vorkonditionierung

Es werden überlappende Gebietszerlegungsmethoden vorgestellt, die in besonderem Maße zur Konstruktion paralleler Vorkonditionierungen geeignet sind. Der Klassifikation von Smith et al. (1996), Quarteroni und Valli (1999) und Mok (2001) folgend, lassen sich Gebietszerlegungsmethoden in sogenannte überlappende und nicht überlappende einerseits, und duale und gemischte Gebietszerlegungsmethoden andererseits unterscheiden. Erstere werden auch als *Substruktur-* oder *Schurkomplementmethoden* bezeichnet, während letztere in der Regel als *Schwarzsche Gebietszerlegungsmethoden* bezeichnet werden. Die dualen und gemischten Methoden gehören vom geometrischen Standpunkt aus zu den nicht überlappenden Verfahren. Sie verwenden jedoch als Lösungsvariablen auf einem Teilgebietskopplungsrand zusätzlich zu den primären Variablen noch die energetisch konjugierten Größen (gemischte Methoden) beziehungsweise sind ausschließlich in diesen formuliert (duale Methoden).

Die Substrukturmethoden für die Gebietszerlegung wurden von Mok (2001) bei oberflächengekoppelten Fluid-Struktur-Interaktionsproblemen für den Fall zweier Teilgebiete untersucht. In der vorliegenden Arbeit liegt das Augenmerk jedoch nicht auf der Verwendung der Gebietszerlegung in der Kopplung unterschiedlicher physikalischer Felder (beispielsweise in der Fluid-Struktur-Interaktion), sondern auf der effizienten parallelen Lösung der linearen Gleichungssysteme nichtlinearer Strukturprobleme. Eine Beschränkung der Formulierung auf zwei Teilgebiete kann daher hier nicht erfolgen, da sich die Anzahl der Teilgebiete nach der Anzahl der verwendeten Prozesse richtet.

Es erfolgt eine Konzentration auf die überlappenden Schwarzschen Gebietszerlegungsmethoden. Diese bestehen in ihrer Basisformulierung durch ihre Schlichtheit und sehr gute Parallel-

isierbarkeit für viele Teilgebiete. Zusätzlich bieten sie ein gutes Fundament zur Konstruktion sogenannter Multilevelvorkonditionierungen, wie sie in Kap. 6 diskutiert werden. Für eine Übersicht über die nichtüberlappenden Substruktur- oder Schurkomplementmethoden sowie die dualen Methoden, die ebenfalls zu Parallelisierungszwecken eingesetzt werden können, sei auf die Veröffentlichungen von Quarteroni und Valli (1999), Smith et al. (1996), Le Tallec (1994), Wohlmuth (2001), Douglas et al. (2003), Fragakis und Papadrakakis (2003) und Mok (2001) verwiesen.

4.5.1 Alternierende Schwarzsche Gebietszerlegung

Der Mathematiker H.A. Schwarz stellte 1870 sein "alternierendes Verfahren" vor zum Beweis der Existenz harmonischer Funktionen in kompliziert berandeten Gebieten Ω , die sich als Vereinigung zweier einfacher, überlappender Gebiete Ω_1 und Ω_2 darstellen lassen (Schwarz (1870)). Er verwendete dazu nachstehende Abb. 4.10, die hier zur Begriffsdefinition dienen soll.

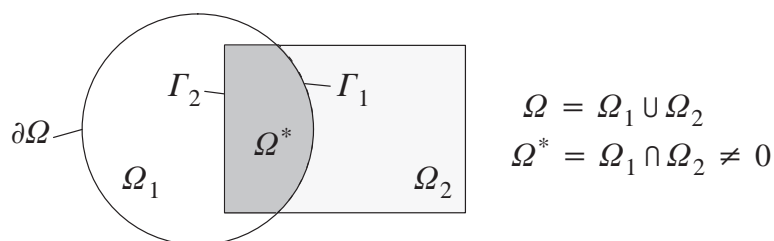


Abb. 4.10: Schwarzsche überlappende Gebietszerlegung

Verallgemeinert auf mehr als zwei Teilgebiete sei ein Gebiet Ω unterteilt in N^P überlappende Teilgebiete Ω_i :

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^{N^P} \Omega_i . \quad (4.41)$$

$\partial\Omega$ sei der Rand von Ω und $\partial\Omega_i$ der Rand des Teilgebiets Ω_i , wobei alle Gebiete nicht ihre Ränder enthalten. Weiter sei Γ_i derjenige Teil vom Rand $\partial\Omega_i$, der innerhalb von Ω liegt. Der restliche Rand wird mit $\partial\Omega_i \setminus \Gamma_i$ bezeichnet.

Anmerkung: Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden tatsächliche Dirichlet-Randbedingungen auf $\partial\Omega_i \setminus \Gamma_i$ als 'physikalische' Randbedingungen bezeichnet. Dirichlet-Randbedingungen von Teilgebieten, die im Rahmen von Gebietszerlegungsmethoden eingeführt werden, werden hingegen als 'künstliche' Dirichlet-Randbedingungen bezeichnet.

Auf einem gegebenen Gebiet Ω , das hier exemplarisch in $N^P = 2$ überlappende Teilgebiete Ω_1 und Ω_2 zerlegt wird, soll ein beliebiges lineares elliptisches Randwertproblem gelöst werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &= f && \text{in } \Omega \\ u &= u_D && \text{auf } \partial\Omega . \end{aligned} \quad (4.42)$$

Gegeben sei eine Schätzung $u_0^{\Omega_2}$ zumindest auf dem Rand Γ_1 . Mit dem Iterationszähler $k = 1, 2, \dots$ lautet das alternierende Schwarzsche Verfahren dann:

$$\begin{array}{ll}
\text{Löse für } \mathbf{u}_k^{\Omega_1} : & \text{Löse für } \mathbf{u}_k^{\Omega_2} : \\
\mathcal{L}\mathbf{u}_k^{\Omega_1} = \mathbf{f} & \text{in } \Omega_1 & \mathcal{L}\mathbf{u}_k^{\Omega_2} = \mathbf{f} & \text{in } \Omega_2 \\
\mathbf{u}_k^{\Omega_1} = \mathbf{u}_D & \text{auf } \partial\Omega_1 \setminus \Gamma_1 & \mathbf{u}_k^{\Omega_2} = \mathbf{u}_D & \text{auf } \partial\Omega_2 \setminus \Gamma_2 \\
\mathbf{u}_k^{\Omega_1} = \mathbf{u}_{k-1}^{\Omega_2} & \text{auf } \Gamma_1 & \mathbf{u}_k^{\Omega_2} = \mathbf{u}_k^{\Omega_1} & \text{auf } \Gamma_2
\end{array} \quad (4.43)$$

$$k \leftarrow k + 1$$

In jedem Halbschritt wird also ein Teilproblem mit den physikalischen Dirichlet–Randbedingungen auf $\partial\Omega$ und künstlichen Dirichlet–Randbedingungen auf Γ_i , die auf der jeweils vorhergehenden näherungsweisen Lösung beruhen, gelöst.

4.5.2 Multiplikative–Schwarzsche–Gebietszerlegung (MSM)

Die alternierende Schwarzsche Gebietszerlegung wird nun zur Lösung des linearen Gleichungssystems $\mathbf{A}\mathbf{d} = \mathbf{f}$ herangezogen. Es wird direkt die Formulierung als Vorkonditionierung gegeben, da es als solche hier im Rahmen des CG–Verfahrens eingesetzt wird. Eine Schwarzsche Gebietszerlegungsvorkonditionierung entspricht dann einem Iterationsschritt in Gl. (4.43) mit einer Startschätzung $\mathbf{u}_0^{\Omega_2} = \mathbf{0}$.

Der Vorkonditionierungsschritt des CG–Verfahrens (Anhang A2.4, Gl. (A.11)) lautet im Iterationsschritt k :

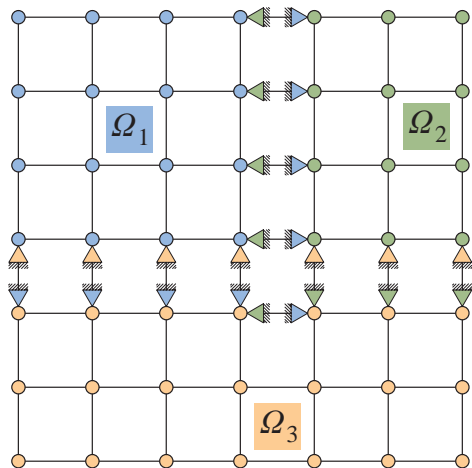
$$\mathbf{z}_k = \mathbf{M}_{SM}^{-1} \mathbf{r}_k . \quad (4.44)$$

\mathbf{M}_{SM}^{-1} ist die Vorkonditionierung auf der Basis Schwarzscher Gebietszerlegung in N^P überlappende Teilgebiete. \mathbf{r}_k ist der Vektor der residuellen Kräfte und \mathbf{z}_k der Vektor des vorkonditionierten Residuums im CG–Iterationsschritt k . Auf die Angabe des Iterationszählers k wird im weiteren der Einfachheit halber verzichtet. Um die Notation der Formulierung möglichst übersichtlich zu halten, wird weiter angenommen, dass alle physikalischen Dirichlet–Randbedingungen \mathbf{d}_D auf die rechte Seite des Gleichungssystems $\mathbf{A}\mathbf{d} = \mathbf{f}$ gebracht wurden:

$$\mathbf{f} \leftarrow \mathbf{f} - \mathbf{A}_{\Gamma_D} \mathbf{d}_D . \quad (4.45)$$

Ferner seien Ω^h sowie Ω_i^h Diskretisierungen von Ω und Ω_i . Da im weiteren ausschließlich diskretisierte Gebiete betrachtet werden, wird ohne Verwechslungsgefahr auf den Kopfzeiger $(\cdot)^h$ verzichtet.

a) Teilgebiete und deren Randbedingungen



 künstliche Dirichlet-Randbedingungen

b) Bezeichnung der Unbekannten z

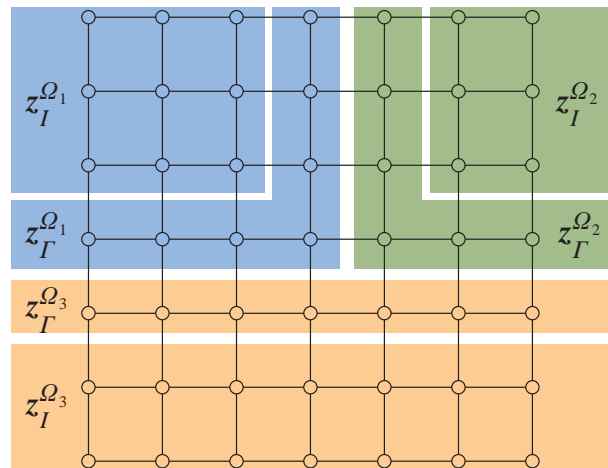


Abb. 4.11: Gebietszerlegung mit Überlappungsbreite von einer Elementreihe

Beträgt bei einer flächenhaften Diskretisierung die Breite des Überlappungsbereiches der Teilgebiete genau eine Elementreihe, so kann der Vektor der Unbekannten \mathbf{z} aus Gl. (4.44) wie folgt partitioniert werden:

$$\mathbf{z}^T = \left[\begin{array}{cc|cc|ccc} \mathbf{z}_I^{\Omega_1} & \mathbf{z}_\Gamma^{\Omega_1} & \mathbf{z}_I^{\Omega_2} & \mathbf{z}_\Gamma^{\Omega_2} & \cdots & \mathbf{z}_I^{\Omega_{N^P}} & \mathbf{z}_\Gamma^{\Omega_{N^P}} \end{array} \right]. \quad (4.46)$$

Hierin werden mit $(\cdot)_I^{\Omega_i}$ Größen eines Teilgebiets bezeichnet, die nicht auf einem künstlichen Gebietsrand liegen. $(\cdot)_\Gamma^{\Omega_i}$ bezeichnet dann diejenigen Unbekannten, die mit Knoten assoziiert sind, die in Ω_i auf einem künstlichen Teilgebietsrand Γ eines mit Ω_i überlappenden Teilgebietes Ω_j , $j \neq i$ liegen. Abb. 4.11 veranschaulicht dies für die zweidimensionale Diskretisierung aus Abb. 4.2a) für eine Aufteilung in drei Teilgebiete.

Die zugehörige Partitionierung der Koeffizientenmatrix nimmt dann folgende Gestalt an:

$$\mathbf{A} = \left[\begin{array}{cc|cc|ccc} \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{11}} & \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{11}} & & & & & \\ \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{11}} & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{11}} & & \mathbf{A}_{\Gamma\Gamma}^{\Omega_{12}} & & \mathbf{A}_{\Gamma\Gamma}^{\Omega_{13}} & \\ \hline & & \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{22}} & \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{22}} & & & \\ & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{21}} & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{22}} & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{22}} & & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{23}} & \\ \hline & & & & \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{33}} & \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{33}} & \\ \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{31}} & & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{32}} & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{33}} & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{33}} & \mathbf{A}_{\Gamma I}^{\Omega_{33}} & \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{A}^{\Omega_{11}} & \mathbf{A}^{\Omega_{12}} & \mathbf{A}^{\Omega_{13}} \\ \hline \mathbf{A}^{\Omega_{21}} & \mathbf{A}^{\Omega_{22}} & \mathbf{A}^{\Omega_{23}} \\ \hline \mathbf{A}^{\Omega_{31}} & \mathbf{A}^{\Omega_{32}} & \mathbf{A}^{\Omega_{33}} \end{array} \right]. \quad (4.47)$$

Hierin sind Blockeinträge $\mathbf{A}^{\Omega_{ii}}$ mit inneren Freiheitsgraden eines Teilgebiets Ω_i assoziiert, Nebendiagonaleinträge $\mathbf{A}^{\Omega_{ij}}$, $i \neq j$ resultieren aus dem Überlappungsbereich zweier Teilgebiete Ω_i und Ω_j .

Anmerkung: Man beachte, dass dies der Datenzerlegung aus Kap. 3.3.4 entspricht. Die im folgenden erläuterten Methoden werden anhand der in Gl. (4.46), (4.47) und Abb. 4.11 exemplarischen Partitionierung mit einer Überlappungsbreite von einer Elementreihe gezeigt. Dies schränkt jedoch keineswegs die Verwendung größerer Überlappungsbreiten ein.

An dieser Stelle soll eine Notation eingeführt werden, die ausgesprochen nützlich ist und im weiteren Verlauf der Arbeit noch intensiv verwendet wird. $\mathbf{R}^{\Omega_i} \in \mathbb{R}^{N^{\Omega_i} \times N}$ sei eine rechteckige Matrix, N ist die Anzahl der Zeilen und Spalten von \mathbf{A} und N^{Ω_i} die Anzahl der Unbekannten in Teilgebiet Ω_i . Ferner ist:

$$\mathbf{z}^{\Omega_i} = \mathbf{R}^{\Omega_i} \mathbf{z} = \left[\begin{array}{cccc} \mathbf{0}^{\Omega_1} & \mathbf{0}^{\Omega_2} & \cdots & \mathbf{I}^{\Omega_i} \cdots \mathbf{0}^{\Omega_{N^P}} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \mathbf{z}^{\Omega_1} \\ \mathbf{z}^{\Omega_2} \\ \vdots \\ \mathbf{z}^{\Omega_i} \\ \vdots \\ \mathbf{z}^{\Omega_{N^P}} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \mathbf{z}_I^{\Omega_i} \\ \mathbf{z}_\Gamma^{\Omega_i} \end{array} \right], \quad i = 1, \dots, N^P. \quad (4.48)$$

Es sind $\mathbf{0}^{\Omega_j} \in \mathbb{R}^{N^{\Omega_i} \times N^{\Omega_j}}$, $i \neq j$ Nullmatrizen und $\mathbf{I}^{\Omega_i} \in \mathbb{R}^{N^{\Omega_i} \times N^{\Omega_i}}$ die Einheitsmatrix. \mathbf{R}^{Ω_i} heißt *Restriktionsmatrix* oder kurz *Restriktion*, da sie angewandt auf einen Vektor der Knotenwerte des Gleichungssystems Gl. (4.44) diejenigen eines Teilgebietes i liefert.

Anmerkung: Bei anderer Sortierung der Unbekannten als in Gl. (4.46) ergibt sich eine Permutation von \mathbf{R}^{Ω_i} mit Nullspalten für Freiheitsgrade, die nicht zu Ω_i gehören.

Die Transponierte

$$\mathbf{P}^{\Omega_i} = \left(\mathbf{R}^{\Omega_i} \right)^T, \quad i = 1, \dots, N^P \quad (4.49)$$

wird *Prolongationsmatrix* oder kurz *Prolongation* genannt. Angewandt auf den Teilgebietsvektor \mathbf{z}^{Ω_i} ergibt sich:

$$\mathbf{z} = \sum_{i=1}^{N^P} \left(\mathbf{P}^{\Omega_i} \mathbf{z}^{\Omega_i} \right). \quad (4.50)$$

Den mit einem Teilgebiet Ω_i assoziierten Teil der Koeffizientenmatrix erhält man dann mit:

$$\mathbf{A}^{\Omega_{ii}} = \mathbf{R}^{\Omega_i} \mathbf{A} \mathbf{P}^{\Omega_i} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{ii}} & \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{ii}} \\ \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{ii}} & \mathbf{A}_{II}^{\Omega_{ii}} \end{bmatrix}, \quad i = 1, \dots, N^P. \quad (4.51)$$

Ist \mathbf{A} symmetrisch und positiv definit, so ist auch $\mathbf{A}^{\Omega_{ii}}$ symmetrisch und positiv definit.

An dieser Stelle soll noch die sogenannte *Teilgebietskorrektur*

$$\mathbf{B}^{\Omega_i} = \mathbf{P}^{\Omega_i} \left(\mathbf{A}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1} \mathbf{R}^{\Omega_i} = \mathbf{P}^{\Omega_i} \left(\mathbf{R}^{\Omega_i} \mathbf{A} \mathbf{P}^{\Omega_i} \right)^{-1} \mathbf{R}^{\Omega_i}, \quad \mathbf{B}^{\Omega_i} \in \mathbb{R}^{N \times N}, \quad i = 1, \dots, N^P \quad (4.52)$$

eingeführt werden.

Angewandt auf einen Vektor \mathbf{r} restriktiert \mathbf{B}^{Ω_i} diesen auf einen Teilgebietsvektor \mathbf{r}^{Ω_i} , löst für \mathbf{r}^{Ω_i} mit der Teilgebietskoeffizientenmatrix $\mathbf{A}^{\Omega_{ii}}$ und prolongiert die Lösung zurück auf einen Vektor $\mathbf{z}^{\leftarrow \Omega_i}$ der Dimension N :

$$\begin{array}{l} \text{Restriktion des Residuums :} \\ \text{Teilgebietslösung :} \\ \text{Prolongation :} \\ \hline \text{Teilgebietskorrektur :} \end{array} \quad \begin{array}{l} \mathbf{r}^{\Omega_i} = \mathbf{R}^{\Omega_i} \mathbf{r}, \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^N, \quad \mathbf{r}^{\Omega_i} \in \mathbb{R}^{N^{\Omega_i}} \\ \downarrow \\ \mathbf{z}^{\Omega_i} = \left(\mathbf{A}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1} \mathbf{r}^{\Omega_i}, \quad \mathbf{z}^{\Omega_i} \in \mathbb{R}^{N^{\Omega_i}} \\ \downarrow \\ \mathbf{z}^{\leftarrow \Omega_i} = \mathbf{P}^{\Omega_i} \mathbf{z}^{\Omega_i}, \quad \mathbf{z}^{\leftarrow \Omega_i} \in \mathbb{R}^N \\ \mathbf{z}^{\leftarrow \Omega_i} = \mathbf{B}^{\Omega_i} \mathbf{r}^{\Omega_i} \end{array} \quad (4.53)$$

Mit einem Startvektor $\mathbf{z}_0 = \mathbf{0}$ lautet die *Multiplikative–Schwarzsche–Gebietszerlegungs–Vorkonditionierung* (MSM) in N^P Teilschritten dann:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_{\frac{1}{N^P}} &= \mathbf{z}_0 + \mathbf{B}^{\Omega_1} (\mathbf{r} - \mathbf{A} \mathbf{z}_0) = \mathbf{B}^{\Omega_1} \mathbf{r} \\ \mathbf{z}_{\frac{2}{N^P}} &= \mathbf{z}_{\frac{1}{N^P}} + \mathbf{B}^{\Omega_2} (\mathbf{r} - \mathbf{A} \mathbf{z}_{\frac{1}{N^P}}) \\ &\vdots \\ \mathbf{z} &= \mathbf{z}_{\frac{N^P-1}{N^P}} + \mathbf{B}^{\Omega_{N^P}} (\mathbf{r} - \mathbf{A} \mathbf{z}_{\frac{N^P-1}{N^P}}). \end{aligned} \quad (4.54)$$

Setzt man die Teilschritte der Vorkonditionierung Gl. (4.54) ineinander ein, so erhält man nach einigen Umformungen eine geschlossene Darstellung:

$$\mathbf{M}_{MSM}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \left[\mathbf{I} - (\mathbf{I} - \mathbf{A} \mathbf{B}^{\Omega_{N^P}}) (\mathbf{I} - \mathbf{A} \mathbf{B}^{\Omega_{N^P-1}}) \dots (\mathbf{I} - \mathbf{A} \mathbf{B}^{\Omega_2}) (\mathbf{I} - \mathbf{A} \mathbf{B}^{\Omega_1}) \right]. \quad (4.55)$$

Auf dieser Darstellung begründet sich auch die Namensgebung Multiplikative Schwarzsche Gebietszerlegung.

Anmerkung: In einer Implementierung werden die Matrizen \mathbf{R}^{Ω_i} , \mathbf{P}^{Ω_i} und \mathbf{B}^{Ω_i} nicht explizit aufgestellt, sondern jeweils nur deren Anwendung auf einen Vektor bestimmt.

Es kann gezeigt werden, dass die Multiplikative Schwarzsche Gebietszerlegung eine Verallgemeinerung der Gauss–Seidel–Vorkonditionierung ist (Smith et al. (1996)): Für den Sonderfall zweier Teilgebiete $N^P = 2$ folgt aus Gl. (4.55) mit Gl. (4.52) die Matrixdarstellung:

$$\mathbf{M}_{MSM}^{-1} = \begin{bmatrix} (\mathbf{A}^{\Omega_{11}})^{-1} & \mathbf{0} \\ -(\mathbf{A}^{\Omega_{22}})^{-1} \mathbf{A}^{\Omega_{21}} (\mathbf{A}^{\Omega_{11}})^{-1} & (\mathbf{A}^{\Omega_{22}})^{-1} \end{bmatrix}. \quad (4.56)$$

Die Gauss–Seidel–Vorkonditionierungsmatrix Gl. (4.25) für eine nichtsinguläre Koeffizientenmatrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ lautet:

$$\mathbf{M}_{GS}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22}^{-1} \end{bmatrix}. \quad (4.57)$$

Die Analogie zwischen Gl. (4.56) und Gl. (4.57) ist deutlich sichtbar. Wie die Gauss–Seidel–Vorkonditionierung ist die MSM–Vorkonditionierung nicht symmetrisch und nicht unabhängig von der Numerierung der Teilgebiete, so dass sie in dieser Form nicht innerhalb des CG–Verfahrens verwendet werden kann.

In Analogie zur symmetrischen Gauss–Seidel–Vorkonditionierung lässt sich eine symmetrische MSM–Vorkonditionierung (SMSM) erstellen, indem man in Gl. (4.54) den N^P Teilschritten wei-

tere N^P Teilschritte in umgekehrter Reihenfolge der Teilgebiete hinzufügt. Mit $z_0 = \mathbf{0}$ lautet die SMSM–Vorkonditionierung:

$$\begin{aligned}
z_{\frac{1}{2N^P}} &= z_0 + \mathbf{B}^{\Omega_1} (\mathbf{r} - \mathbf{A} z_0) = \mathbf{B}^{\Omega_1} \mathbf{r} \\
z_{\frac{2}{2N^P}} &= z_{\frac{1}{2N^P}} + \mathbf{B}^{\Omega_2} (\mathbf{r} - \mathbf{A} z_{\frac{1}{2N^P}}) \\
&\vdots \\
z_{\frac{N^P-1}{2N^P}} &= z_{\frac{N^P-2}{2N^P}} + \mathbf{B}^{\Omega_{(N^P-1)}} (\mathbf{r} - \mathbf{A} z_{\frac{N^P-2}{2N^P}}) \\
z_{\frac{1}{2}} &= z_{\frac{N^P-1}{2N^P}} + \mathbf{B}^{\Omega_{N^P}} (\mathbf{r} - \mathbf{A} z_{\frac{N^P-1}{2N^P}}) \\
z_{\frac{N^P+1}{2N^P}} &= z_{\frac{1}{2}} + \mathbf{B}^{\Omega_{(N^P-1)}} (\mathbf{r} - \mathbf{A} z_{\frac{1}{2}}) \\
&\vdots \\
z_{\frac{2N^P-1}{2N^P}} &= z_{\frac{2N^P-2}{2N^P}} + \mathbf{B}^{\Omega_2} (\mathbf{r} - \mathbf{A} z_{\frac{2N^P-2}{2N^P}}) \\
z &= z_{\frac{2N^P-1}{2N^P}} + \mathbf{B}^{\Omega_1} (\mathbf{r} - \mathbf{A} z_{\frac{2N^P-1}{2N^P}}) .
\end{aligned} \tag{4.58}$$

Die SMSM–Vorkonditionierung kann für das CG–Verfahren verwendet werden. Eine parallele Implementierung der MSM– oder der SMSM–Vorkonditionierung ist nicht ohne weiteres möglich, da zur Berechnung einer Teilgebietslösung die jeweils vorhergehenden Teilgebietslösungen vorliegen müssen. Mittels einer sogenannten ‘Mehrfarben’–Multiplikativen–Schwarzschen–Gebietszerlegung (Multicolour Multiplicative Schwarz Method) lässt sich bei einer Zerlegung in hinreichend viele Teilgebiete eine parallele Abarbeitung realisieren. Dabei wird jeweils einer Gruppe von Teilgebieten, die untereinander nicht überlappen, eine ‘Farbe’ zugeordnet. Alle Teilgebiete einer Farbe können dann parallel bearbeitet werden, da ihre künstlichen Randbedingungen in Gl. (4.54) beziehungsweise (4.58) unabhängig voneinander sind. Eine detailliertere Erläuterung dieser Mehrfarben–Parallelisierung findet man für die MSM–Vorkonditionierung in Smith et al. (1996) und Quarteroni und Valli (1999), Algorithmen zur Mehrfarbenindexierung von Teilgebieten und Gleichungssystemen und deren Anwendung werden in Saad (1996) gegeben.

4.5.3 Additive–Schwarzsche–Gebietszerlegung (ASM)

Einfacher als die in vorigem Kapitel genannte Einführung einer Mehrfarben–Gebietszerlegung ist es, bei der Teilgebietskorrektur auf Ω_i nicht auf die Lösung aus Teilgebiet Ω_{i-1} aufzubauen, sondern jeweils nur den Startwert $z_0 = \mathbf{0}$ in allen Teilgebieten zu verwenden. Diese von Dryja und Widlund (1987) vorgeschlagene Modifikation führt die Multiplikative Schwarzsche Gebietszerlegung Gl. (4.54) über in

$$z = z_0 + \sum_{i=1}^{N^P} (\mathbf{B}^{\Omega_i} (\mathbf{r} - \mathbf{A} z_0)) = \sum_{i=1}^{N^P} (\mathbf{B}^{\Omega_i} \mathbf{r}) . \tag{4.59}$$

Diese *Additive Schwarzsche*–Vorkonditionierung (ASM) lautet somit:

$$\mathbf{M}_{ASM}^{-1} = \sum_{i=1}^{N^P} \mathbf{B}^{\Omega_i} . \quad (4.60)$$

Wie bei der Analogie zwischen der MSM–Vorkonditionierung und dem Gauss Seidel–Iterationsverfahren existiert hier eine Analogie zwischen der ASM–Vorkonditionierung und der Jacobi–Vorkonditionierung. Im Falle von $N^P = 2$ Teilgebieten ist \mathbf{M}_{ASM}^{-1} in Matrixdarstellung:

$$\mathbf{M}_{ASM}^{-1} = \begin{bmatrix} (\mathbf{A}^{\Omega_{11}})^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{A}^{\Omega_{22}})^{-1} \end{bmatrix} . \quad (4.61)$$

Die Jacobi–Vorkonditionierungsmatrix Gl. (4.24) für eine nichtsinguläre Koeffizientenmatrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ lautet zum Vergleich:

$$\mathbf{M}_J^{-1} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & A_{22}^{-1} \end{bmatrix} . \quad (4.62)$$

Die ASM–Vorkonditionierung kann direkt parallelisiert werden, alle Teilgebetslösungen in Gl. (4.59) sind voneinander unabhängig durchführbar. Zudem ist Gl. (4.60) symmetrisch und kann somit direkt als Vorkonditionierung im CG–Verfahren verwendet werden.

4.5.4 Schwarzsche Gebietszerlegung mit unvollständiger Lösung der Teilgebiete

Es ist sinnvoll und effizient in einer Formulierung als Vorkonditionierung anstatt der Teilgebetskorrektur Gl. (4.52) nur eine näherungsweise Korrektur (eine Vorkonditionierung) der Teilgebiete vorzunehmen. Führt man hierzu die *Teilgebetsvorkonditionierung*

$$\left(\mathbf{M}^{\Omega_{ii}}\right)^{-1} \approx \left(\mathbf{A}^{\Omega_{ii}}\right)^{-1} , \quad i = 1, \dots, N^P \quad (4.63)$$

ein, so lautet der unvollständige Korrekturoperator aus Gl. (4.52) nun:

$$\tilde{\mathbf{B}}^{\Omega_i} = \mathbf{P}^{\Omega_i} \left(\mathbf{M}^{\Omega_{ii}}\right)^{-1} \mathbf{R}^{\Omega_i} \approx \mathbf{B}^{\Omega_i} = \mathbf{P}^{\Omega_i} \left(\mathbf{A}^{\Omega_{ii}}\right)^{-1} \mathbf{R}^{\Omega_i} , \quad i = 1, \dots, N^P . \quad (4.64)$$

Als Teilgebetsvorkonditionierung $\left(\mathbf{M}^{\Omega_{ii}}\right)^{-1}$ können sämtliche sequentiellen und symmetrischen Basisverfahren der Vorkonditionierung herangezogen werden.

4.5.5 Konvergenzverhalten Schwarzscher Gebietszerlegungskonditionierung

Für das ASM–vorkonditionierte CG–Verfahren gilt nach Gl. (4.31) und (4.32) im Iterationsschritt k :

$$\| \mathbf{d}^k - \mathbf{d} \|_A \leq 2 \left[\frac{\sqrt{c(\mathbf{M}_{ASM}^{-1} \mathbf{A})} - 1}{\sqrt{c(\mathbf{M}_{ASM}^{-1} \mathbf{A})} + 1} \right]^k \| \mathbf{d}^0 - \mathbf{d} \|_A . \quad (4.65)$$

Bezeichnet man mit h den Knotenabstand der Diskretisierung, mit H den Durchmesser der Teilgebiete und mit δH , $0 < \delta \leq 1$ die Breite der Überlappung benachbarter Teilgebiete, so kann die Kondition abgeschätzt werden zu

$$c(\mathbf{M}_{ASM}^{-1} \mathbf{A}) \leq C \frac{1}{\delta^2 H^2} , \quad (4.66)$$

worin C eine Konstante ist, die von \mathbf{A} abhängt (Dryja und Widlund (1994), Quarteroni und Valli (1999)). Weiter lassen sich folgende Aussagen treffen, die das Konvergenzverhalten beschreiben (Smith et al. (1996)):

- Die Anzahl der benötigten CG–Iterationen wächst mit $1/H$.
- Die Anzahl benötigter Iterationen wächst mit der Anzahl der Teilgebiete.
- Ist die Überlappungsbreite δH proportional zu H gehalten und wird eine Teilgebietskorrektur nach Gl. (4.52) verwendet, so ist die Anzahl benötigter CG–Iterationen unabhängig von h und H/h beschränkt.
- Die Konvergenz ist schlecht für kleine Überlappungsbreiten δH , verbessert sich jedoch mit zunehmender Überlappung rasch.
- Die Anzahl benötigter CG–Iterationen ist bei der ASM–Vorkonditionierung ungefähr doppelt so hoch wie bei der MSM–Variante.

Die in Kap. 4.5.2 und 4.5.3 gezeigte Analogie der Schwarzschen Gebietszerlegung zur Gauss–Seidel– beziehungsweise Jacobi–Vorkonditionierungen zeigt sich auch im Konvergenzverhalten. Jacobi– und Gauss–Seidel–Vorkonditionierungen erfassen Fehler, die bezogen auf den Knotenabstand h als langwellig gelten können, nur sehr schlecht. Analog ist bei der ASM– und MSM–Vorkonditionierung die Fehlerreduktion von im Verhältnis zur Teilgebietsabmessung H langwelliger Fehleranteile bei kleinen Überlappungsbreiten gering.

Um dieses Verhalten zu demonstrieren, wird das Beispiel des Kragarms aus Abb. 4.4 aufgegriffen. Der Kragarm wird in zwei bis vier Teilgebiete mit einer Überlappungsbreite von einer Elementreihe unterteilt (Abb. 4.12a)–c)). Es wird eine ASM–Vorkonditionierung mit unvollständiger Teilgebietslösung Gl. (4.64) verwendet.

Als Teilgebietsvorkonditionierung wird eine ILU(1)–Faktorisierung eingesetzt:

$$\left(\mathbf{M}^{\Omega_{ii}}\right)^{-1} = \left(\mathbf{M}_{ILU(1)}^{\Omega_{ii}}\right)^{-1}, \quad i = 1, \dots, N^P. \quad (4.67)$$

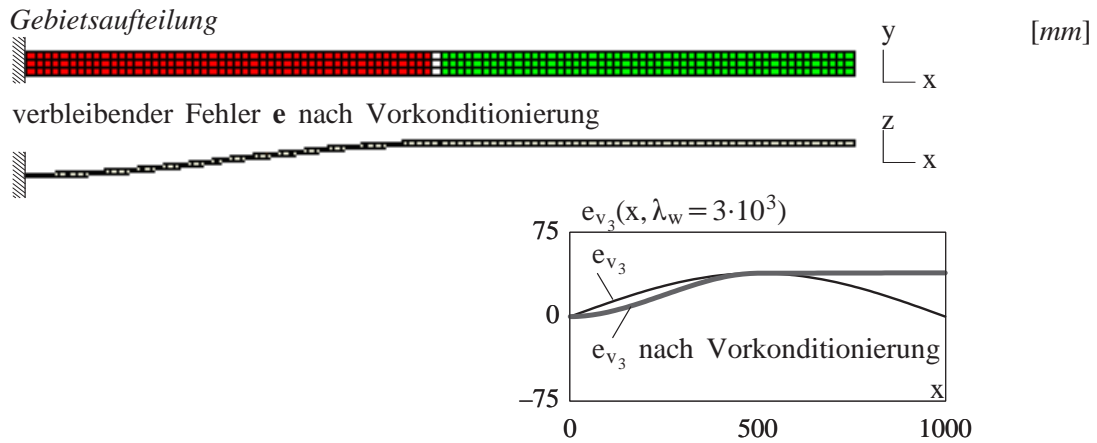
Als Startschätzung wird der mit einem langwelligen Fehler in der z –Mittelflächenverschiebung behaftete Vektor $\mathbf{d}_{v_3, lang}^0$ aus Gl. (4.39) vorgegeben. Abb. 4.12 zeigt den verbleibenden Fehler nach einer ASM–ILU(1)–Vorkonditionierung für die drei verschiedenen Teilgebietsaufteilungen.

Der Fehler am Ort der künstlichen Dirichlet–Randbedingungen der Teilgebiete wird nicht reduziert und bleibt daher auch innerhalb der Teilgebiete erhalten. Am deutlichsten ist dies im Teilgebiet am freien Ende des Kragarms in Abb. 4.12a)–c) zu erkennen.

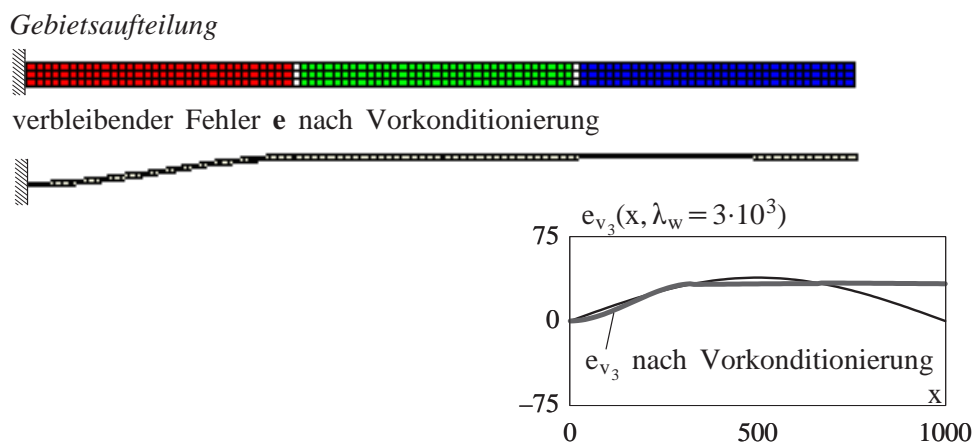
Vor allem für eine große Anzahl an Teilgebieten ergibt sich so eine unbefriedigende Qualität der ASM–Vorkonditionierung.

Der entscheidende Vorteil der ASM–Vorkonditionierung liegt darin, dass die Teilgebietslösungen parallel und kommunikationsfrei erstellt werden können. Hinzu kommt, dass die Anzahl der benötigten Operationen bei einer ILU–Faktorisierung mit der Größe des Gleichungssystems überlinear anwächst. Es wird daher für die ILU–Faktorisierungen von N^P Blöcken der Koeffizientenmatrix bei geringer Überlappungsbreite insgesamt weniger Zeit benötigt als für eine unvollständige Faktorisierung des Gesamtgleichungssystems. Dieser als 'Divide and Conquer'–Effekt bezeichnete Umstand führt zusammen mit der sehr guten Parallelisierbarkeit der ASM–Methode dazu, dass die durch Parallelisierung erzielbare Beschleunigung des einzelnen Vorkonditionierungsschrittes im Vergleich zur sequentiellen ILU–Vorkonditionierung überoptimal im Sinne von Amdahls Gesetz Gl. (4.1) ist.

a) Zwei Teilgebiete



b) Drei Teilgebiete



c) Vier Teilgebiete

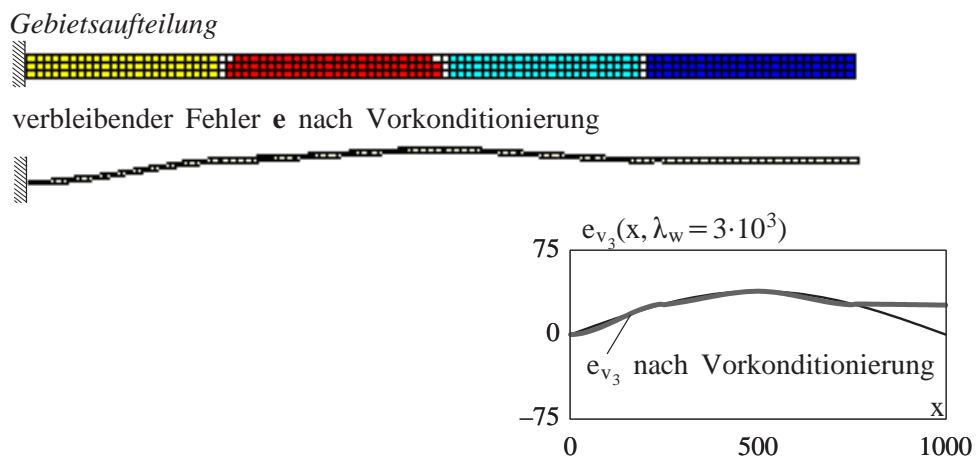


Abb. 4.12: Fehlerverläufe nach ASM-ILU(1) Vorkonditionierung

Die Schwarzsche Gebietszerlegung bildet daher eine sehr gute Ausgangsbasis zur Konstruktion einer parallelen Vorkonditionierung. Es muss jedoch ein Weg gefunden werden, die beschriebene 'Schwäche' in der Reduktion des Fehlers auf den künstlichen Teilgebietsrändern zu beseitigen.

Man kann sich hierzu folgende Umstände zunutze machen:

- Der Ansatz der Schwarzschen Gebietszerlegung ist nicht beschränkt auf konforme Diskretisierungen.
- Es können beliebig viele Teilgebiete mit einer beliebigen Überlappungsbreite verwendet werden, sofern die Mindestüberlappungen eingehalten sind. Einzelne Teilgebiete können jedoch vollständig andere Teilgebiete überlagern.
- Der Fehleranteil, der nicht oder sehr schlecht erfasst wird, ist langwellig bezüglich des Knotenabstandes h und der Teilgebietsabmessung H und besitzt nur einen geringen oder keinen räumlichen Gradienten.
- Dieser Fehleranteil kann mit guter Genauigkeit auf einer wesentlich gröberen Diskretisierung approximiert werden.

Fügt man daher zu den überlappenden Teilgebieten weitere hinzu, die mit einer gröberen Diskretisierung das Gesamtgebiet umfassen, so sind auf diesen *Grobgridern* die problematischen langwelligen Fehlerkomponente gut zu approximieren und effizient mit wenigen Unbekannten zu korrigieren. Wird eine solche *Grobgridkorrektur* im Rahmen von Gebietszerlegungsmethoden verwendet, so spricht man von *Multilevel–Gebietszerlegung*. In Kap. 6 wird eine solche Multilevelvorkonditionierung für dünnwandige Schalenstrukturen erläutert, die auf den überlappenden Schwarzschen Gebietszerlegungsmethoden aufbaut.

5 Skalierter–Direktor–Ansatz für die 7–Parameter–Schalenformulierung

5.1 Die Konditionierung bei dünnwandigen Strukturen

Eines der großen Probleme in der Modellierung dünnwandiger Strukturen ist die ausgesprochen schlechte Konditionierung der resultierenden Steifigkeitsmatrizen in Abhängigkeit der Schlankheit der Struktur. Das Ausmaß der Schlechkonditionierung ist vom Typ der verwendeten Formulierung abhängig. Um einen ersten Einblick in die Problematik zu geben, wird die in Abb. 5.1 dargestellte Quadratplatte der Dicke t mit 10×10 Elementen verschiedener Formulierungen diskretisiert und eine Eigenwertanalyse der resultierenden Steifigkeitsmatrizen vorgenommen. Es wird ein St.Venant–Kirchhoff–Materialgesetz mit $E = 1 \cdot 10^3$ und $\nu = 0.0$ verwendet.

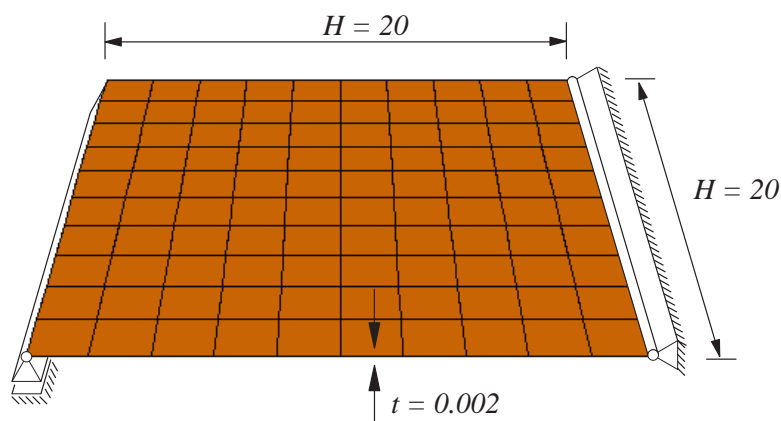


Abb. 5.1: dünne Quadratplatte

Die im Folgenden verglichenen Formulierungen sind:

- Die in dieser Arbeit verwendete 7–Parameter–Schalenformulierung (Kap. 2.2) mit einer Parametrisierung des Verschiebungsfeldes mittels dreier Mittelflächenverschiebungen und drei Differenzvektorkomponenten des Schalendirektors. Der siebte Freiheitsgrad ist die über den EAS–Ansatz eingebrachte, linear über die Dicke verlaufende Verzerrung \tilde{E}_{33} . Diese Formulierung wird im Weiteren kurz als 7–PM (7–Parameter–Modell) bezeichnet.
- Eine 'klassische' Schalenformulierung mit einer Reissner–Mindlin Kinematik und einer Parametrisierung des Verschiebungsfeldes mittels dreier Mittelflächenverschiebungen und zwei Rotationsfreiheitsgraden am Knoten (Naghdi (1972)). Diese 5–Parameter–Schalenformulierung beinhaltet im Gegensatz zum 7–PM keine Kinematik, die eine Dickenänderung der Schale berücksichtigt. Sie wird hier

kurz als *5-PM* (5-Parameter-Modell) bezeichnet, da dieses Modell 5 kinematische Freiheitsgrade besitzt.

- Eine der vorbeschriebenen *5-PM* Schalenformulierung entsprechende Formulierung, die jedoch eine Parametrisierung des Verschiebungsfeldes mittels dreier Mittelflächenverschiebungen und zwei Differenzvektorverschiebungen anstatt Rotationsfreiheitsgraden besitzt. Dieses Modell beinhaltet ebenfalls keine Dickenänderung der Schale und wird hier kurz als *5-PMD* (für 5-Parameter-Modell mit Differenzvektor) bezeichnet.
- Eine Diskretisierung mit trilinearen Kontinuumselementen, im weiteren kurz als *Solid* bezeichnet.

Für alle Formulierungen werden hier aus Gründen der Vergleichbarkeit bi- beziehungsweise trilineare verschiebungsbasierte Finite Elemente ohne jegliche Verbesserung des mechanischen Verhaltens durch hybride Ansätze oder spezielle Integrations- oder Interpolationsverfahren benutzt. Auf den Einfluss solcher Ansätze wird jedoch in Kap. 5.3 gesondert eingegangen.

Der im *7-PM* zusätzlich zu den Verschiebungsfreiheitsgraden mit der EAS-Methode eingebrachte siebte Verzerrungsfreiheitsgrad wird hier als Bestandteil der Formulierung und nicht als 'Elementverbesserung' betrachtet. Die spektralen Konditionszahlen

$$c(\mathbf{K}) = \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{K})}{\lambda_{\min}(\mathbf{K})} \quad (5.1)$$

der resultierenden Steifigkeitsmatrizen sind in Abhängigkeit von der Schlankheit H/t der Quadratplatte für die einzelnen Formulierungen in Abb. 5.2 dargestellt.

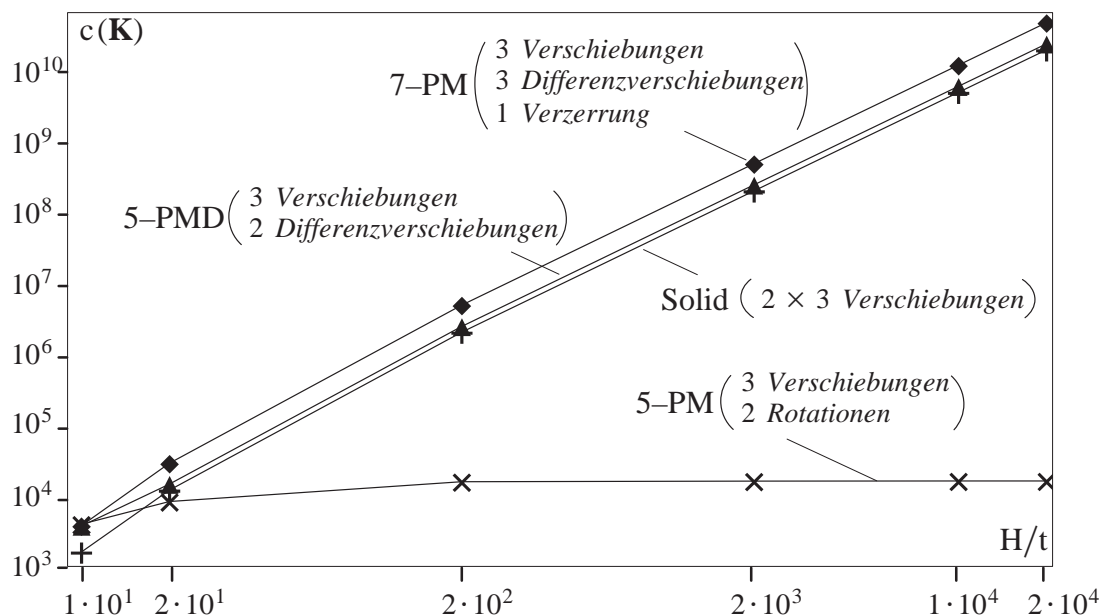


Abb. 5.2: Entwicklung der spektralen Konditionszahl mit der Schlankheit der Quadratplatte für unterschiedliche Formulierungen

Während die Konditionszahl der Steifigkeitsmatrix der 5-Parameter-Formulierung mit Rotationsfreiheitsgraden verhältnismäßig unempfindlich bezüglich einer zunehmenden Schlankheit reagiert, weisen alle Formulierungen, die auf einer Parametrisierung mit Verschiebungen und Differenzverschiebungen basieren, einen extremen Anstieg der Konditionszahlen auf.

Die Tatsache, dass die einzelnen betrachteten Modelle unterschiedliche Kinematiken aufweisen (mit/ohne Dickenänderung, mit über die Dicke linearen/konstanten Verzerrungen E_{33} in Dickenrichtung), ist nicht der einzige Grund für dieses unterschiedliche Verhalten in der Konditionierung. Die Modelle 5-PM und 5-PMD besitzen in diesem Beispiel eine identische Kinematik bei lediglich verschiedener Parametrisierung des Verschiebungsfeldes, ihr Verhalten ist in der Konditionierung der resultierenden Matrizen jedoch sehr unterschiedlich. Es ist daher offensichtlich, dass der Wahl der Parametrisierung eine entscheidende Rolle für die Abhängigkeit der Konditionierung von der Schlankheit zukommt.

Für eine festgehaltene Schalenquerschnittsrotation $\phi = \text{konstant}$ ist bei einer Parametrisierung mit Differenzverschiebungen der Betrag der Differenzverschiebungen von der Dicke der Schale abhängig und wird umso kleiner, je dünner die Schale ist (Abb. 5.3). Im Gegensatz hierzu ist die Darstellung der gleichen Querschnittsrotation mit Rotationsfreiheitsgraden naturgemäß dickenunabhängig.

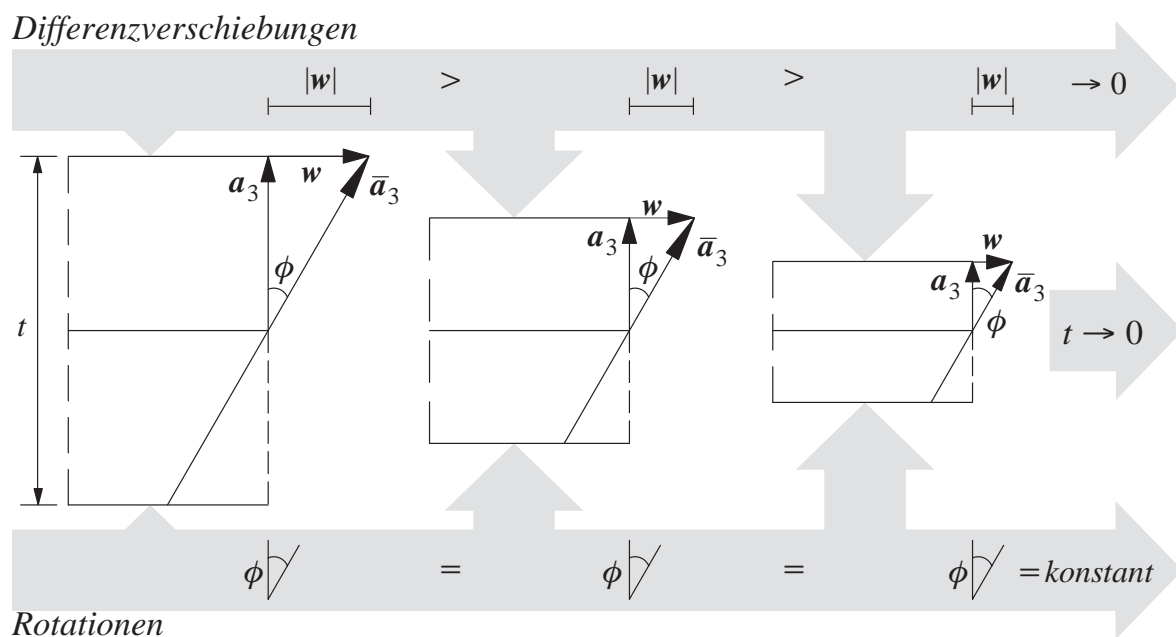


Abb. 5.3: Abhängigkeit der Parametrisierung von der Schalendicke t

Wählt man nun wie in der 7-Parameter-Schalenformulierung die Komponenten von w als primäre Unbekannte, so führt dies mit zunehmender Schlankheit der Struktur zu einem betragsmäßigen Anwachsen der mit diesen Unbekannten assoziierten Steifigkeiten, was zu der im Vergleich zum klassischen 5-Parameter-Modell mit Rotationsfreiheitsgraden besonders schlechten Konditionierung der Systemsteifigkeitsmatrix führt.

Dieser Umstand ist in der Literatur hinlänglich bekannt und dient teilweise als Argument dafür, dass eine solche Parametrisierung – bei all ihren sonstigen Vorteilen wie der einfachen singularitätenfreien Darstellung endlicher Rotationen (Büchter (1992)) und der deutlich vereinfachten Variation, Linearisierung und Zeitableitung – nicht gewählt wird (Simo et al. (1990b)).

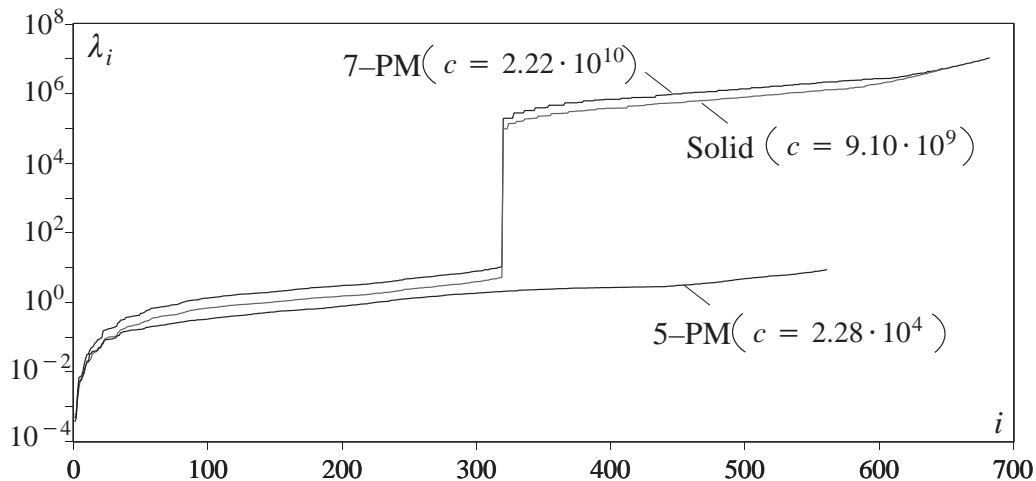


Abb. 5.4: Eigenwertspektren verschiedener Formulierungen

Es soll betont werden, dass dünnwandige Strukturen, auch wenn sie mit einer klassischen 5-Parameter-Schalenformulierung modelliert werden, aufgrund der grossen Steifigkeitsunterschiede zwischen Biege-, Membran- und Schubanteilen bereits recht schlecht konditionierte Steifigkeitsmatrizen ergeben. Die hier diskutierte Schlechkonditionierung durch die Parametrisierung mit Differenzverschiebungen ist daher als *zusätzliche* Verschlechterung zu begreifen. Um einen tieferen Einblick in die Problematik zu erhalten, werden in Abb. 5.4 für die Quadratplatte aus Abb. 5.1 mit einer extremen Schlankheit von $H/t = 1 \cdot 10^4$ die Eigenwertspektren der Steifigkeitsmatrizen bei einer Modellierung mit der 7-Parameter-Formulierung, mit der klassischen 5-Parameter Formulierung und mit Kontinuumselementen dargestellt.

Man erkennt einen charakteristischen Sprung im Eigenwertspektrum des 7-PM und der Solid-Diskretisierung, der beim 5-PM nicht vorkommt. Weiter kann man feststellen, dass die Verwendung der Differenzverschiebungen beim 7-PM im Vergleich zur Solid-Diskretisierung mit seinen totalen Verschiebungen keine wesentliche zusätzliche Verschlechterung der Kondition ergibt. Auch die über den siebten Verzerrungsfreiheitsgrad eingebrachte linear über die Schalendicke verlaufende Verzerrung \tilde{E}_{33} scheint keinen besonderen Einfluss auf die Konditionierung im Vergleich zur Solid-Diskretisierung mit konstantem Verlauf von E_{33} zu haben. Um den Sprung im Eigenwertspektrum des 7-PM besser deuten zu können, sind in Abb. 5.5 ausgewählte Eigenformen der Quadratplatte mit $H/t = 1 \cdot 10^4$ visualisiert und mit ihrem jeweiligen Eigenwert im Spektrum assoziiert.

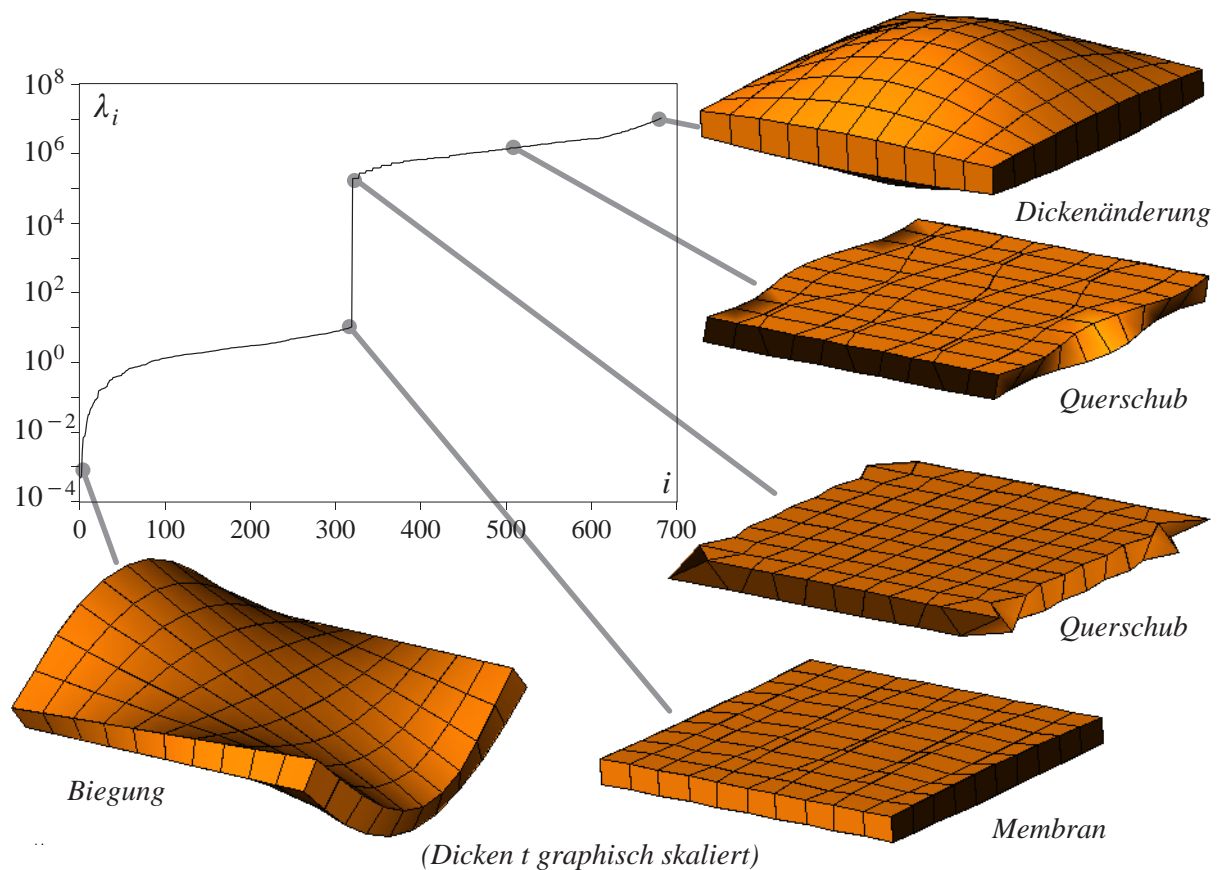


Abb. 5.5: Spektrum und ausgewählte Eigenformen für die 7-Parameter-Formulierung

Die niedrigsten Eigenwerte gehören demnach erwartungsgemäß zu den Biegemoden, gefolgt von den Membranzuständen, die im Spektrum bis vor dem Sprung angesiedelt sind. Die Moden oberhalb des Sprungs sind Querschubzustände, und am oberen Ende des Spektrums befinden sich die Moden der Dickenänderung. Dies bestätigt die bereits geäußerte Erwartung, dass die schlechte Konditionierung des 7-PM durch die hohen Steifigkeiten in den an Schub- und Dickenänderungsmoden besonders beteiligten Differenzverschiebungsfreiheitsgraden verursacht wird. Um die Konditionierung zu verbessern, müssen daher diese Skalenunterschiede in den Steifigkeiten verringert und ihre 'unheilvolle' Abhängigkeit von der Schlankheit der Schale behoben werden.

Dies kann durch die Verwendung eines in seiner Länge skalierten Schalendirektors erfolgen. Dieser bereits in Gee et al. (2004), Ramm et al. (2003) und Wall et al. (2000) vorgestellte Ansatz namens *Skalierter Direktor Ansatz* (Scaled Director Conditioning (SDC)) entkoppelt den Betrag der Differenzverschiebungen von der Schalendicke und ermöglicht so eine mit einer 5-Parameter-Schalenformulierung mit Rotationsfreiheitsgraden vergleichbare Konditionierung der resultierenden Steifigkeitsmatrizen. Dabei werden alle mit der Parametrisierung durch Differenzverschiebungen verbundenen Vorteile – wie die einfache Darstellung großer Rotationen – beibehalten. Lassen sich die Differenzverschiebungen in Flächenrichtung noch durch Rotationen ersetzen, gibt es jedoch für die Dickenänderung keine entsprechende Alternative.

5.2 Skalierter–Direktor–Ansatz (SDC)

Die Skalenunterschiede in den Steifigkeiten der Differenzverschiebungen zu den Mittelflächenverschiebungen werden durch eine Skalierung des Direktorfeldes, wie in Abb. 5.6 dargestellt, angeglichen.

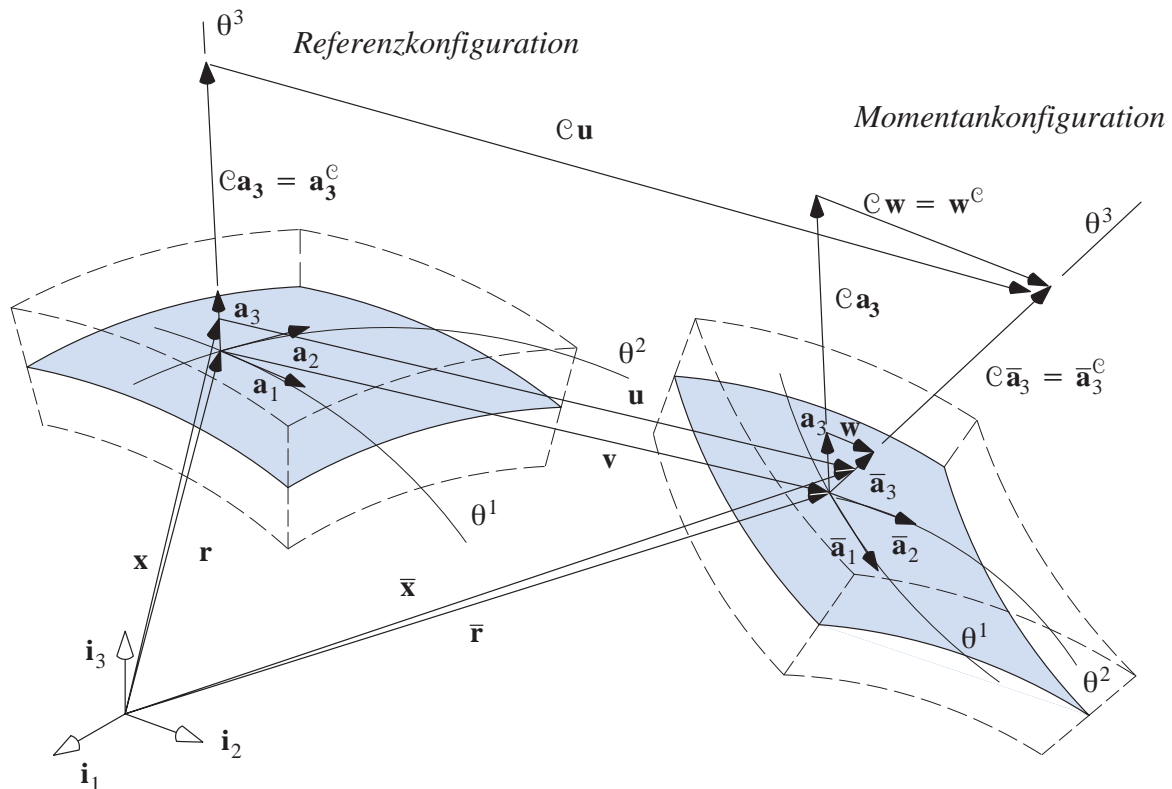


Abb. 5.6: Kinematik der 7-Parameter Schalenformulierung mit skaliertem Direktor

An den physikalischen Eigenschaften der Schalenformulierung soll durch die Skalierung nichts verändert werden. Hierzu wird der Skalierungsfaktor \mathcal{C} konsistent in die Formulierung eingearbeitet. Die Lösung wird dann anstatt in unskalierten diskreten Verschiebungen der Mittelfläche \mathbf{v} und Differenzverschiebungen \mathbf{w} in skalierten Verschiebungen \mathbf{v} und \mathbf{w}^c bestimmt. Die ursprünglichen Differenzverschiebungen \mathbf{w} lassen sich zu jedem Zeitpunkt aus den skalierten Verschiebungen \mathbf{w}^c rückrechnen.

Die Wahl des Skalierungsfaktors \mathcal{C} ergibt sich aus der Elementgeometrie. Da die Kondition für Elemente, deren Abmessungen in den drei Raumdimensionen ungefähr gleich sind, optimal ist, wird der Skalierungsfaktor so gewählt, dass die skalierte Dicke des Schalenelements den Elementabmessungen h in der Schalenebene entspricht:

$$\mathcal{C}a_3 \approx \frac{h}{2} . \quad (5.2)$$

5.2.1 Modifizierte Basisvektoren, Kinematik und algorithmische Verzerrungen

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels 5 nehmen griechische Indizes die Werte 1 und 2 an, lateinische die Werte 1 bis 3. Zusätzlich gilt die Einsteinsche Summationskonvention (Summation über gleiche Indizes).

Der Skalierungsfaktor \mathbb{C} wird über die Basisvektoren der konvektiven Koordinaten der Schalenmittelfläche in der Referenzkonfiguration eingebracht und modifiziert nur den Basisvektor \mathbf{a}_3 in Dickenrichtung der Schale:

$$\mathbf{a}_\alpha = \mathbf{r}_{,\alpha} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta^\alpha} \quad , \quad \mathbf{a}_3^{\mathbb{C}} = \mathbb{C} \frac{t}{2} \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|} . \quad (5.3)$$

Die Basisvektoren in der Momentankonfiguration ergeben sich mit den skalierten Differenzverschiebungen nach Abb. 5.6 zu:

$$\bar{\mathbf{a}}_\alpha = \bar{\mathbf{r}}_{,\alpha} \quad , \quad \bar{\mathbf{a}}_3^{\mathbb{C}} = \mathbf{a}_3^{\mathbb{C}} + \mathbf{w}^{\mathbb{C}} . \quad (5.4)$$

Die Basisvektoren $\mathbf{g}_i^{\mathbb{C}}$ und $\bar{\mathbf{g}}_i^{\mathbb{C}}$ des Schalenkörpers werden mit Hilfe dieser modifizierten Basisvektoren der Schalenmittelfläche ausgedrückt:

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_\alpha &= \mathbf{a}_\alpha + \frac{\theta^3}{\mathbb{C}} \mathbf{a}_{3,\alpha}^{\mathbb{C}} & \mathbf{g}_3^{\mathbb{C}} &= \mathbf{a}_3^{\mathbb{C}} , \\ \bar{\mathbf{g}}_\alpha &= \bar{\mathbf{a}}_\alpha + \frac{\theta^3}{\mathbb{C}} \bar{\mathbf{a}}_{3,\alpha}^{\mathbb{C}} & \bar{\mathbf{g}}_3^{\mathbb{C}} &= \bar{\mathbf{a}}_3^{\mathbb{C}} . \end{aligned} \quad (5.5)$$

Dabei wird darauf geachtet, dass wiederum nur \mathbf{g}_3 und $\bar{\mathbf{g}}_3$ eine Skalierung erfahren. Aus den modifizierten Basisvektoren des Schalenkörpers ergeben sich dann *algorithmische* Green–Lagrange–Verzerrungen:

$$\begin{aligned} E_{ij}^{\mathbb{C}} &= E_{ij}^{u\mathbb{C}} + \tilde{E}_{ij}^{\mathbb{C}} \approx \alpha_{ij}^{\mathbb{C}} + \frac{t}{2} \theta^3 \beta_{ij}^{\mathbb{C}} \\ E_{ij}^{u,\mathbb{C}} &= \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{g}}_i^{\mathbb{C}} \cdot \bar{\mathbf{g}}_j^{\mathbb{C}} - \mathbf{g}_i^{\mathbb{C}} \cdot \mathbf{g}_j^{\mathbb{C}}) \\ E_{ij}^{\mathbb{C}} &= E_{ij}^{u\mathbb{C}} \quad ; \quad (i,j) \neq (3,3) \\ E_{33}^{\mathbb{C}} &= E_{33}^{u\mathbb{C}} + \tilde{E}_{33}^{\mathbb{C}} = \alpha_3^{\mathbb{C}} \cdot \mathbf{w}^{\mathbb{C}} + \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathbb{C}} \cdot \mathbf{w}^{\mathbb{C}} + \theta^3 \tilde{\beta}_{33}^{\mathbb{C}} \end{aligned} \quad (5.6)$$

$\alpha_{kl}^{\mathbb{C}}$ und $\beta_{kl}^{\mathbb{C}}$ sind über die Schalendicke konstante und linear verlaufende Verzerrungskomponenten. Diese algorithmischen Verzerrungen werden im B–Operator zur Erstellung der skalierten tangentiellen Steifigkeitsmatrix und zur Berechnung der algorithmischen konsistenten inneren Knotenkräfte verwendet. Die tatsächlichen Green–Lagrange–Verzerrungen können aus den bekannten, unmodifizierten Basisvektoren und den zugehörigen Metriken ermittelt werden.

5.2.2 Modifizierte Integration, tangentielle Steifigkeit und innere Kräfte

Bis jetzt wurden algorithmische Verzerrungen ermittelt, die sich auf die skalierte Schalendicke und skalierte Schalenbasisvektoren und –metriken bezogen haben. Es müssen sich nun auch die

Materialtangente C^{ijkl} und die Zweiten Piola–Kirchhoff–Spannungen S^{ij} auf die skalierte Basis beziehen. Hierzu wird mit beiden Tensoren eine entsprechende Tensortransformation

$$\mathbb{C}^{ijkl\mathbb{C}} = b_m^{i\mathbb{C}} b_n^{j\mathbb{C}} b_p^{k\mathbb{C}} b_q^{l\mathbb{C}} C^{mpq} \quad (5.7)$$

und

$$S^{ij\mathbb{C}} = b_m^{i\mathbb{C}} b_n^{j\mathbb{C}} S^{mn} \quad (5.8)$$

durchgeführt, mit $b_j^{i\mathbb{C}}$ als Transformation zwischen unskalierten und skalierten Basisvektoren:

$$\mathbf{g}_j^{\mathbb{C}} = b_j^{i\mathbb{C}} \mathbf{g}_i, \quad [b_j^{i\mathbb{C}}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{C} \end{bmatrix}. \quad (5.9)$$

Wird ein St. Venant–Kirchhoff–Materialgesetz verwendet, so lässt sich die Materialtangente mit den Lamé–Konstanten aus Gl. (2.16) direkt in den \mathbb{C} –skalierten Basen $\mathbf{g}_i^{\mathbb{C}}$ aufstellen:

$$\mathbb{C}^{ijkl\mathbb{C}} = \lambda_L g^{ij\mathbb{C}} g^{kl\mathbb{C}} + \mu_L (g^{ik\mathbb{C}} g^{jl\mathbb{C}} + g^{il\mathbb{C}} g^{kj\mathbb{C}}). \quad (5.10)$$

Die algorithmischen Zweiten Piola–Kirchhoff–Spannungen folgen dann aus:

$$\mathbf{S}^{\mathbb{C}} = \underline{\mathbb{C}}^{\mathbb{C}} : \mathbf{E}^{\mathbb{C}}. \quad (5.11)$$

Auf diese Weise können für den materiell linearen Fall die Transformationen Gl. (5.7) und (5.8) eingespart werden. Wird ein nichtlineares Materialgesetz verwendet, so wird dieses häufig nicht in konvektiven Schalenkoordinaten aufgestellt und die resultierende algorithmische Materialtangente sowie die Spannungen müssen daher in Schalenbasen transformiert werden. Bei Anwendung der SDC–Vorkonditionierung kann dann eine Transformation direkt in das \mathbb{C} –skalierte Basissystem $\mathbf{g}_i^{\mathbb{C}}$ erfolgen, so dass auch hier keine zusätzlichen Tensortransformationen Gl. (5.7)–(5.9) nötig werden. Gl. (5.7)–(5.9) kommen daher nur bei direkt in konvektiven Schalenbasen \mathbf{g}_i formulierten nichtlinearen Materialgesetzen zur Anwendung. Es muss selbstverständlich darauf geachtet werden, dass die Eingangsgrößen der jeweiligen Materialformulierung keine \mathbb{C} –skalierten algorithmischen, sondern tatsächliche Werte darstellen.

Bei der Vorabintegration des Stoffgesetzes und der Integration der Spannungen über die Schalendicke darf dann nur die unskalierte Dicke der Schale berücksichtigt werden. Es muss daher der unmodifizierte Schalenshifter $\hat{\mu}$ aus Gl. (2.41) verwendet werden:

$$\int_V (\cdot) dV = \int_A \int_{-1}^1 (\cdot) \hat{\mu} d\theta^3 dA, \quad \hat{\mu} = \frac{1}{\mathbb{C}} \frac{(\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2) \cdot \mathbf{g}_3^{\mathbb{C}}}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|}, \quad (5.12)$$

Für die Vorabintegration des Stoffgesetzes gilt dann für die über die Schalendicke konstanten, linearen und quadratischen Anteile

$$D_n^{ijkl\mathcal{C}} = \int_{-1}^1 \left(\frac{\theta^3}{\mathcal{C}}\right)^n \mathbb{C}^{ijkl\mathcal{C}} \left(\frac{t}{2}\right)^n \hat{\mu} d\theta^3, \quad n \in \{0, 1, 2\}, \quad (5.13)$$

so im Falle eines linearen Materialgesetzes für die algorithmischen Spannungsergebnisse und Verzerrungen folgt:

$$\begin{bmatrix} n^{ij\mathcal{C}} \\ m^{ij\mathcal{C}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_0^{ijkl\mathcal{C}} & D_1^{ijkl\mathcal{C}} \\ D_1^{ijkl\mathcal{C}} & D_2^{ijkl\mathcal{C}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{kl}^{\mathcal{C}} \\ \beta_{kl}^{\mathcal{C}} \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

Hierin sind $n^{ij\mathcal{C}}$ und $m^{ij\mathcal{C}}$ algorithmische Schnittgrößen und $\alpha_{kl}^{\mathcal{C}}$ und $\beta_{kl}^{\mathcal{C}}$ die über die Schalendicke konstanten und linear veränderlichen algorithmischen Verzerrungskomponenten aus Gl. (5.6). Liegt kein lineares Materialverhalten vor, so erhält man die algorithmischen Schnittgrößen aus:

$$n^{ij\mathcal{C}} = \int_{-1}^1 S^{ij\mathcal{C}} \hat{\mu} d\theta^3, \quad m^{ij\mathcal{C}} = \int_{-1}^1 \frac{\theta^3}{\mathcal{C}} S^{ij\mathcal{C}} \frac{t}{2} \hat{\mu} d\theta^3. \quad (5.15)$$

5.2.3 Inkrementelle Lösung

Nach der Variation, Linearisierung und Diskretisierung des der 7-Parameter Schalenformulierung zugrundeliegenden modifizierten Hu–Washizu–Funktional (Kap. 2.2) folgt das Gleichungssystem für das SDC-skalierte Verschiebungs- und Verzerrungsinkrement für eine statische Betrachtung:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_T^{\mathcal{C}} & \mathbf{L}^{\mathcal{C}T} \\ \mathbf{L}^{\mathcal{C}} & \tilde{\mathbf{D}}^{\mathcal{C}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{d}^{\mathcal{C}} \\ \Delta \mathbf{a}^{\mathcal{C}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{f}^{\mathcal{C}} \\ \tilde{\mathbf{f}}^{\mathcal{C}} \end{bmatrix}. \quad (5.16)$$

Hierin ist die aus Anfangs-, materieller und geometrischer Steifigkeitsmatrix bestehende SDC-vorkonditionierte tangentielle Steifigkeitsmatrix

$$\mathbf{K}_T^{\mathcal{C}} = \int_{A^{el}} \mathbf{B}^{\mathcal{C}T} \mathbf{D}^{\mathcal{C}} \mathbf{B}^{\mathcal{C}} dA^{el} + \int_{A^{el}} \mathbf{B}^{\mathcal{C}T,d} \mathbf{S}_h^{u\mathcal{C}} dA^{el}, \quad (5.17)$$

$\mathbf{B}^{\mathcal{C}}$ ist die SDC-modifizierte B-Operatormatrix und $\mathbf{D}^{\mathcal{C}}$ das SDC-modifizierte vorabintegrierte Stoffgesetz der Schale in Matrixschreibweise.

L^{cT} und L^c sind SDC-modifizierte Kopplungsmatrizen und \tilde{D}^c die SDC-vorkonditionierte Verzerrungsmatrix (siehe auch Kap. 2.4):

$$L^{cT} = \int_{A^{el}} \tilde{M}^{cT} D^c B^c dA^{el} , \quad (5.18)$$

$$L^c = \int_{A^{el}} B^{cT} D^c \tilde{M}^c dA^{el} ,$$

$$\tilde{D}^c = \int_{A^{el}} \tilde{M}^{cT} D^c \tilde{M}^c dA^{el} . \quad (5.19)$$

Die Vektoren der SDC-skalierten inneren Kräfte ergeben sich zu:

$$f^{intc} = \int_{A^{el}} E_{h,d}^{uc} S_h^{uc} dA^{el} , \quad \tilde{f}^{intc} = \int_{A^{el}} \tilde{E}_{h,\alpha}^c \tilde{S}_h^c dA^{el} . \quad (5.20)$$

Die inkrementellen zusätzlichen EAS-Verzerrungen $\Delta \alpha^c$ können auf Elementebene kondensiert werden, so dass das Elementgleichungssystem nunmehr in skalierten inkrementellen Verschiebungen formuliert werden kann:

$$\underbrace{\left(K_T^c - L^{cT} \tilde{D}^{c-1} L^c \right)}_{\hat{K}^c} \Delta d^c = f - \underbrace{f^{intc} + L^{cT} \tilde{D}^{c-1} \tilde{f}^{intc}}_{-\hat{f}^c} . \quad (5.21)$$

Nach der Lösung von Gl. (5.21) für die skalierten Verschiebungen Δd^c kann der Skalierungsfaktor \mathcal{C} mit

$$\Delta d = \begin{bmatrix} \Delta v \\ \Delta w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta v \\ \frac{\Delta w^c}{\mathcal{C}} \end{bmatrix} \quad (5.22)$$

zum Zwecke der Ergebnisausgabe und Visualisierung entfernt werden.

Die vorab über die Schalendicke integrierte Materialtangente D^c und der B-Operator B^c in Gl. (5.17) – (5.19) werden nun hinsichtlich ihrer Skalierung mit \mathcal{C} genauer betrachtet.

Die Skalierungsfaktoren der Koeffizienten der Materialtangente in Matrixschreibweise lauten:

$$\begin{aligned}
 & \quad a_{11} \quad a_{12} \quad a_{13} \quad a_{22} \quad a_{23} \quad a_{33} \quad \beta_{11} \quad \beta_{12} \quad \beta_{13} \quad \beta_{22} \quad \beta_{23} \quad \tilde{\beta}_{33} \\
 D^{ijklc} \Rightarrow D^c = & \left[\begin{array}{cccccccccccc}
 \frac{1}{c^0} D^{1111} & \frac{1}{c^0} D^{1112} & \frac{1}{c^1} D^{(\cdot)} & \frac{1}{c^0} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) \\
 & \frac{1}{c^0} D^{1212} & \frac{1}{c^1} D^{(\cdot)} & \frac{1}{c^0} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) \\
 & & \frac{1}{c^2} D^{(\cdot)} & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^4} (\cdot) \\
 & & & \frac{1}{c^0} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^1} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) \\
 & & & & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^4} (\cdot) \\
 & & & & & \frac{1}{c^4} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^4} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^4} (\cdot) & \frac{1}{c^5} (\cdot) \\
 & & & & & & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^4} (\cdot) \\
 & & & & & & & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^4} (\cdot) \\
 & & & & & & & & \frac{1}{c^4} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^4} (\cdot) & \frac{1}{c^5} (\cdot) \\
 & & & & & & & & & \frac{1}{c^2} (\cdot) & \frac{1}{c^3} (\cdot) & \frac{1}{c^4} (\cdot) \\
 & & & & & & & & & & \frac{1}{c^4} (\cdot) & \frac{1}{c^5} (\cdot) \\
 & & & & & & & & & & & \frac{1}{c^6} (\cdot)
 \end{array} \right] \\
 & \quad \text{symmetrisch}
 \end{aligned} \tag{5.23}$$

Die entsprechenden Einträge D^{ijkl} wurden zur Abkürzung mit (\cdot) ersetzt. In Gl. (5.23) sieht man die Verteilung der Skalierungsfaktoren c^{-k} , $k \in \{0...6\}$, die sich aus der Darstellung der Materialtangente $\underline{\mathbb{C}}$ in skalierten Schalenkoordinaten sowie durch die Dickenintegration Gl. (5.13) ergibt.

Die im tangentiellen B-Operator \mathbf{B}^c enthaltenen Skalierungsfaktoren c^l , $l \in \{0, 1\}$ sind in Gl. (5.24) dargestellt. Die in \mathbf{B}^c nicht enthaltenen Verzerrungen $\tilde{\beta}_{33}$ werden mit c^1 skaliert. Mit Gl. (5.17) und (5.21) folgt, dass die Einträge der tangentiellen Steifigkeitsmatrix K_{Tij}^c mit Skalierungsfaktoren $o(1)$ für Steifigkeiten der Mittelflächenverschiebungen, $o(1/c)$ für Nebendiagonalterme zwischen Mittelflächenverschiebungen und Differenzverschiebungen, sowie $o(1/c^2)$ für Steifigkeiten der Differenzverschiebungen skaliert werden.

$$\mathbf{B}^c = \begin{array}{cccccc}
 & v_1 & v_2 & v_3 & w_1^c & w_2^c & w_3^c \\
 \left[\begin{array}{l}
 1(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) & 0 & 0 & 0 \\
 1(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) & 0 & 0 & 0 \\
 \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) \\
 1(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) & 0 & 0 & 0 \\
 \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) \\
 0 & 0 & 0 & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) \\
 \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) \\
 \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) \\
 0 & 0 & 0 & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) \\
 \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) & 1(\cdot) \\
 0 & 0 & 0 & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) & \mathcal{C}(\cdot) \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right] & \begin{array}{l}
 \alpha_{11} \\
 \alpha_{12} \\
 \alpha_{13} \\
 \alpha_{22} \\
 \alpha_{23} \\
 \alpha_{33} \\
 \beta_{11} \\
 \beta_{12} \\
 \beta_{13} \\
 \beta_{22} \\
 \beta_{23} \\
 \tilde{\beta}_{33}
 \end{array}
 \end{array} \quad (5.24)$$

5.3 Auswirkungen von SDC auf die Konditionierung

Das Beispiel der Quadratplatte aus Abb. 5.1 wird hier nochmals aufgegriffen. In Abb. 5.7 werden die Konditionszahlen der Platte für die 7-Parameter-Schalenformulierung ohne

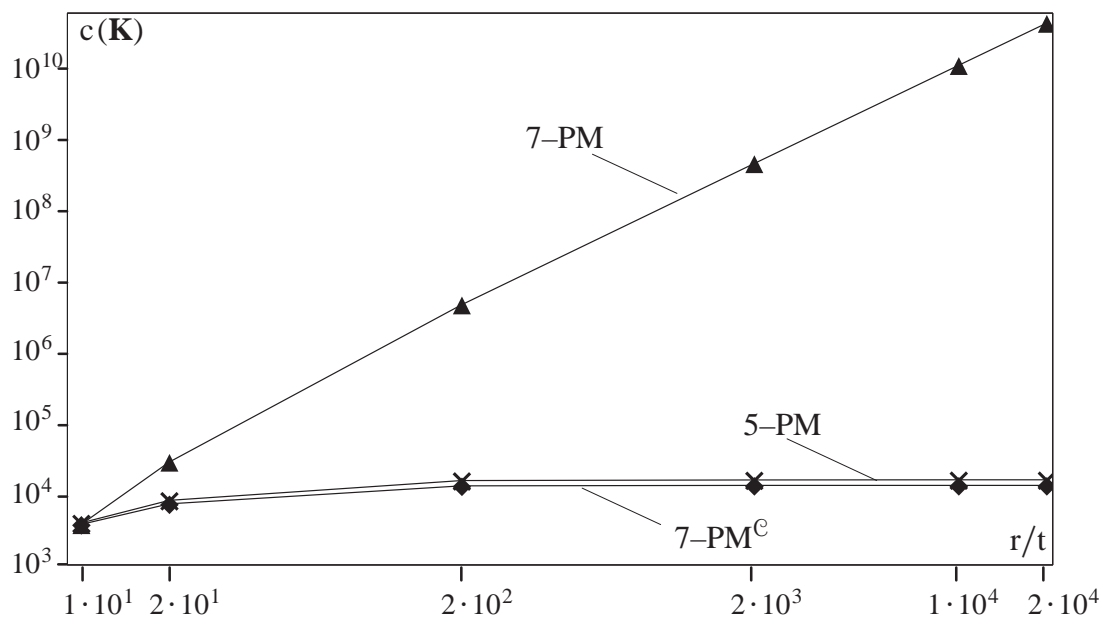


Abb. 5.7: Entwicklung der spektralen Konditionszahl mit der Schlankheit der Quadratplatte bei SDC-Vorkonditionierung

SDC-Vorkonditionierung (7-PM), mit SDC-Vorkonditionierung mit optimalem Skalierungsfaktor (7-PM^c) und die klassische Schalenformulierung (5-PM) in Abhängigkeit der Schlank-

heit verglichen. Das Verhalten des 7-PM^c entspricht nun demjenigen der klassischen Schalenformulierung 5-PM, da dessen Parametrisierung mit skalierten Differenzverschiebungen w^c nun von der Schalendicke unabhängig ist. Abb. 5.8 zeigt die Eigenwertspektren der Quadratplatte mit $H/t = 1 \cdot 10^4$ des ursprünglichen 7-PM, des SDC-vorkonditionierten 7-PM^c und zu Vergleichszwecken der klassischen Schalenformulierung 5-PM. Es kann eine gute Übereinstimmung der Spektren des 7-PM^c und des 5-PM beobachtet werden. Die SDC-Skalierung schliesst den Sprung zwischen den Membran- und den Schub- und Dickenmoden der 7-Parameter-Formulierung. Im Vergleich zum 5-PM hat das 7-PM^c am oberen Ende des Spektrums noch die mit der Schalendickenänderung assoziierten Eigenwerte, die im 5-PM aufgrund der fehlenden Dickenänderung nicht enthalten sind.

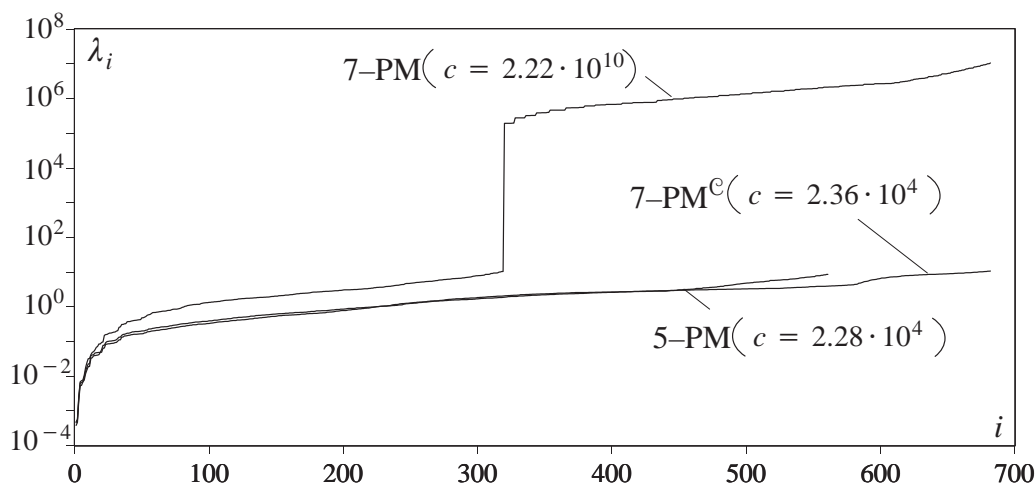


Abb. 5.8: Eigenwertspektrum bei SDC-Vorkonditionierung

Das Argument, dass eine Parametrisierung mit Differenzverschiebungen aufgrund der gegenüber einer Parametrisierung mit Rotationsfreiheitsgraden erheblich schlechteren Kondition nicht verwendet werden kann (Simo et al. (1990b)), kann durch den vorgestellten Skalierten-Direktor-Ansatz entkräftet werden. Neben den bereits genannten Vorteilen einer Differenzvektorformulierung, ist sie damit in der Konditionierung der resultierenden Steifigkeitsmatrizen mit einer klassischen Schalenformulierung konkurrenzfähig.

Es soll nochmals betont werden, dass im statischen Fall der SDC-Ansatz keinerlei Veränderung an der Lösung verursacht. Nach Rückrechnung der Verschiebungskomponenten Gl. (5.22) ergibt sich auch im geometrisch und/oder materiell nichtlinearen statischen Fall die zur 7-PM ohne Skalierung identische Lösung.

Einige zusätzliche Bemerkungen zur SDC-Formulierung sowie zu den gezeigten Eigenwertspektren und Konditionszahlen sind noch hinzuzufügen:

- Die Kondition der 7-Parameter-Schalenformulierung wird durch SDC erheblich verbessert und auf das Niveau von Schalenformulierungen mit Rotationsfreiheitsgraden gebracht. Dies bedeutet jedoch nicht, dass es sich bei den resultierenden Steifigkeitsmatrizen um bereits wohl-

konditionierte Gleichungssysteme handelt. Konditionszahlen im Bereich von $c \approx 10^4$ sowohl für das 5-PM als auch das 7-PM^C (Abb. 5.8) müssen als ausgesprochen hoch angesehen werden. Die Konditionierung verschlechtert sich massiv weiter, wenn im Gegensatz zu den für die Quadratplatte verwendeten verschiebungsbasierten bilinearen Elementen, (deutlich überlegene) hybride Elemente auf der Basis von zum Beispiel EAS (Enhanced Assumed Strain (Simo und Rifai (1990a))) oder ANS (Assumed Natural Strain (Bathe und Dvorkin (1985))) verwendet werden. Die in der Diskretisierung mit bilinearen Verschiebungselementen enthaltenen Lockingeffekte (hier vor allem Querschub-, Schub- und volumetrisches Locking) sind 'künstliche' Versteifungen, die das untere Ende des Eigenwertspektrums stark anheben und sich so auf die Konditionierung positiv auswirken.

Für die Quadratplatte aus Abb. 5.1 wird dies für die SDC-konditionierte 7-Parameter Formulierung in Abb. 5.9 verdeutlicht. Dort ist das Eigenwertspektrum einer Diskretisierung mit hybriden Elementen gegeben, die eine Anreicherung der Ansätze für die (über die Schalendicke konstanten) Membranverzerrungen $\alpha_{11}, \alpha_{22}, \alpha_{12}$ gegen Schub- und volumetrisches Locking, sowie eine ANS-Interpolation der Querschubverzerrungen gegen Querschublocking verwenden. Durch den Wegfall dieser Lockingphänomene fallen die mit den Biege- und Membranmoden assoziierten Eigenwerte am unteren Ende des Spektrums sehr viel niedriger aus – entsprechend verschlechtert sich hierdurch die Konditionierung. Der in Abb. 5.9 sichtbare Sprung im Eigenwertspektrum liegt zwischen den Biege- und den Membranmoden und entspricht daher *nicht* demjenigen in Abb. 5.8, der dort für das 7-PM ohne SDC zwischen den Membran- und den Querschubmoden auftritt.

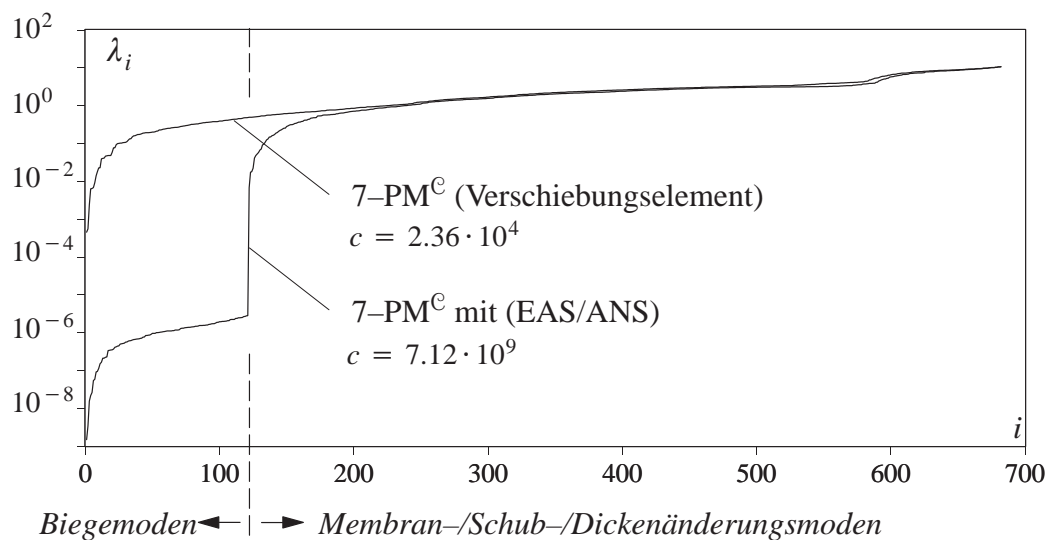


Abb. 5.9: Einfluß hybrider Elementformulierungen auf die Konditionierung

Der Sprung in Abb. 5.8 ist in Abb. 5.9 aufgrund des SDC-Ansatzes gar nicht enthalten. Die Steifigkeitsmatrix des 7-PM^C mit hybriden Elementen hat somit eine Konditionszahl von

$c = 7.12 \cdot 10^9$ im Vergleich zum 7-PM mit hybriden Elementen (ohne Darstellung in Abb. 5.9), für die sich $c = 5.83 \cdot 10^{15}$ ergibt.

- Die Umsetzung von SDC für ein Schalenelement mit EAS wurde in Kap. 5.2 bereits gezeigt, die gleichzeitige Verwendung von SDC und einem ANS-Ansatz ist direkt ohne ergänzende Maßnahmen möglich.
- Ist die Diskretisierung so gewählt, dass der Knotenabstand in der Schalenebene der Elementdicke entspricht oder sogar niedriger ist (also bei sehr feinen Diskretisierungen oder entsprechend dicken Schalen), so ergibt sich nach Gl. (5.2) der triviale Skalierungsfaktor $\mathcal{C} = 1$, eine Verbesserung der Konditionierung kann mit dem SDC-Ansatz dann nicht erreicht werden. Bei Diskretisierungen mit inhomogener Netzdichte ist die Wahl eines optimalen Skalierungsfaktors \mathcal{C} für *alle* Elemente nicht möglich. Nach Gl. (5.2) soll die skalierte Direktorlänge dem halben Knotenabstand in der Schalenebene entsprechen. Numerische Experimente zeigen jedoch, dass die Wahl des Skalierungsfaktors passend für eine *mittlere* Elementabmessung immer noch deutliche Vorteile gegenüber einer Berechnung ohne SDC bringen kann.
- Ein wesentlicher Vorteil des SDC-Ansatzes sind die geringen numerischen Kosten. Nur im Sonderfall eines in konvektiven Schalenkoordinaten formulierten nichtlinearen Materialgesetzes steigt der Aufwand in Form der Tensortransformationen Gl. (5.7) – (5.9) an.
- Es wurde bereits erwähnt, dass im nichtlinearen *statischen* Fall die SDC-Vorkonditionierung an den Ergebnissen keinerlei Veränderung hervorruft – die Mechanik bleibt unverändert und der SDC-Ansatz kann berechtigt als reine Vorkonditionierung bezeichnet werden. Im dynamischen Fall soll dies auch gelten – die SDC-Vorkonditionierung darf die Eigenfrequenzen und somit die Lösung nicht verändern. Auf die Ermittlung der entsprechenden SDC-vorkonditionierten Massenmatrix wird im folgenden Kapitel 5.4 eingegangen.

Die Auswirkung des SDC-Ansatzes auf die Konvergenzgeschwindigkeit iterativer Lösungsverfahren wird anhand von numerischen Beispielen in Kap. 5.5 gezeigt. In Kap. 6.5 wird auf die Kombination des SDC-Ansatzes mit einer algebraischen Multilevel-Vorkonditionierung eingegangen, bevor in Kap. 6.6.2 die Konvergenzbeschleunigung durch eine kombinierte SDC/Multilevelvorkonditionierung an einem Beispiel demonstriert wird.

5.4 Einfluss des SDC-Ansatzes in der Dynamik

Die Lösung eines statisch betrachteten Problems mit SDC ist nach Rückrechnung Gl. (5.22) unverändert. Um dies auch im dynamischen Fall zu gewährleisten, muss der Skalierungsfaktor \mathcal{C} in die Massenmatrix des Systems konsistent eingebracht werden. Dies bedeutet, dass zwar die skalierte Parametrisierung verwendet wird, der virtuelle Energieausdruck jedoch wie im statischen Fall unverändert bleibt. Dieses Vorgehen wird hier ausführlich anhand des Trägheitsterms

des variierten Funktionals beschrieben, da aufgrund dessen Einfachheit das Vorgehen sehr gut veranschaulicht werden kann.

Der Trägheitsterm der Variation des modifizierten Hu–Washizu–Funktionals Gl. (2.47) lautet für den Schalenkörper:

$$\delta\Pi_{HW}^{mod,dyn} = \int_A \int_{\theta^3} \varrho \ddot{\mathbf{x}} \cdot \delta\mathbf{u} \hat{\mu} d\theta^3 dA \quad . \quad (5.25)$$

Mit der skalierten Parametrisierung der Variation der Verschiebungen und der zweiten Zeitableitung des Ortsvektors

$$\delta\mathbf{u} = \delta\mathbf{v} + \frac{\theta^3}{\mathbb{C}} \delta\mathbf{w}^{\mathbb{C}} \quad , \quad \ddot{\mathbf{x}} = \ddot{\mathbf{x}} + \ddot{\mathbf{u}} = \ddot{\mathbf{v}} + \frac{\theta^3}{\mathbb{C}} \ddot{\mathbf{w}}^{\mathbb{C}} \quad (5.26)$$

folgt für ein Element mit Schalenmittelfläche A_{el} :

$$\begin{aligned} \delta\Pi_{HW}^{mod,dyn,el} = & \int_{A^{el}} \left[\underbrace{(\ddot{\mathbf{v}} \cdot \delta\mathbf{v}) \int_{\theta^3} \varrho \hat{\mu} d\theta^3}_{P_{konst}} + \underbrace{(\ddot{\mathbf{v}} \cdot \delta\mathbf{w}^{\mathbb{C}} + \ddot{\mathbf{w}}^{\mathbb{C}} \cdot \delta\mathbf{v}) \int_{\theta^3} \varrho \frac{\theta^3}{\mathbb{C}} \hat{\mu} d\theta^3}_{P_{lin}^{\mathbb{C}}} + \underbrace{(\ddot{\mathbf{w}}^{\mathbb{C}} \cdot \delta\mathbf{w}^{\mathbb{C}}) \int_{\theta^3} \varrho \left(\frac{\theta^3}{\mathbb{C}}\right)^2 \hat{\mu} d\theta^3}_{P_{quad}^{\mathbb{C}}} \right] dA^{el}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

P_{konst} , $P_{lin}^{\mathbb{C}}$, $P_{quad}^{\mathbb{C}}$ sind Abkürzungen für über die Schalendicke integrierte konstante, lineare und quadratische Anteile, in die der Skalierungsfaktor \mathbb{C} in Gl. (5.27) infolge Gl. (5.26) eingeht. Nach der üblichen Diskretisierung der Variation der Verschiebungen und der zweiten Zeitableitung des Ortsvektors mit den Finite–Elemente–Ansatzfunktionen

$$\delta\mathbf{v}_h = N_n \delta\mathbf{v}_{nd}^n \quad , \quad \delta\mathbf{w}_h^{\mathbb{C}} = N_n \delta\mathbf{w}_{nd}^{n\mathbb{C}} \quad , \quad \ddot{\mathbf{v}}_h = N_n \ddot{\mathbf{v}}_{nd}^n \quad , \quad \ddot{\mathbf{w}}_h^{\mathbb{C}} = N_n \ddot{\mathbf{w}}_{nd}^{n\mathbb{C}} \quad (5.28)$$

mit Summation über die Anzahl Knoten eines Finiten Elementes $n = 1, \dots, N_{nd}^{el}$ und den diskreten Knotenwerten $\delta\mathbf{v}_{nd}^n$, $\delta\mathbf{w}_{nd}^{n\mathbb{C}}$, $\ddot{\mathbf{v}}_{nd}^n$, $\ddot{\mathbf{w}}_{nd}^{n\mathbb{C}}$ ist die Massenmatrix:

$$\begin{aligned} \delta\Pi_{HW}^{mod,dyn,el} = & \sum_{n=1}^{N_{nd}^{el}} \sum_{m=1}^{N_{nd}^{el}} \delta\mathbf{v}_{nd}^n \ddot{\mathbf{v}}_{nd}^m \int_{A_{el}} P_{konst} N_n N_m dA_{el} + \sum_{n=1}^{N_{nd}^{el}} \sum_{m=1}^{N_{nd}^{el}} \delta\mathbf{w}_{nd}^{n\mathbb{C}} \ddot{\mathbf{v}}_{nd}^m \int_{A_{el}} P_{lin}^{\mathbb{C}} N_n N_m dA_{el} + \\ & \sum_{n=1}^{N_{nd}^{el}} \sum_{m=1}^{N_{nd}^{el}} \delta\mathbf{v}_{nd}^n \ddot{\mathbf{w}}_{nd}^{m\mathbb{C}} \int_{A_{el}} P_{lin}^{\mathbb{C}} N_n N_m dA_{el} + \sum_{n=1}^{N_{nd}^{el}} \sum_{m=1}^{N_{nd}^{el}} \delta\mathbf{w}_{nd}^{n\mathbb{C}} \ddot{\mathbf{w}}_{nd}^{m\mathbb{C}} \int_{A_{el}} P_{quad}^{\mathbb{C}} N_n N_m dA_{el} \\ & = \delta\mathbf{d}_{el}^{eT} \mathbf{M}_{el}^{\mathbb{C}} \ddot{\mathbf{d}}_{el}^{\mathbb{C}} \end{aligned} \quad (5.29)$$

Hierin sind $\delta\mathbf{d}_{el}^{\mathbb{C}}$ und $\ddot{\mathbf{d}}_{el}^{\mathbb{C}}$ Vektoren der Knotenwerte am Element.

Um die Konsistenz der Skalierung zu zeigen, wird nun das dynamische Eigenwertproblem

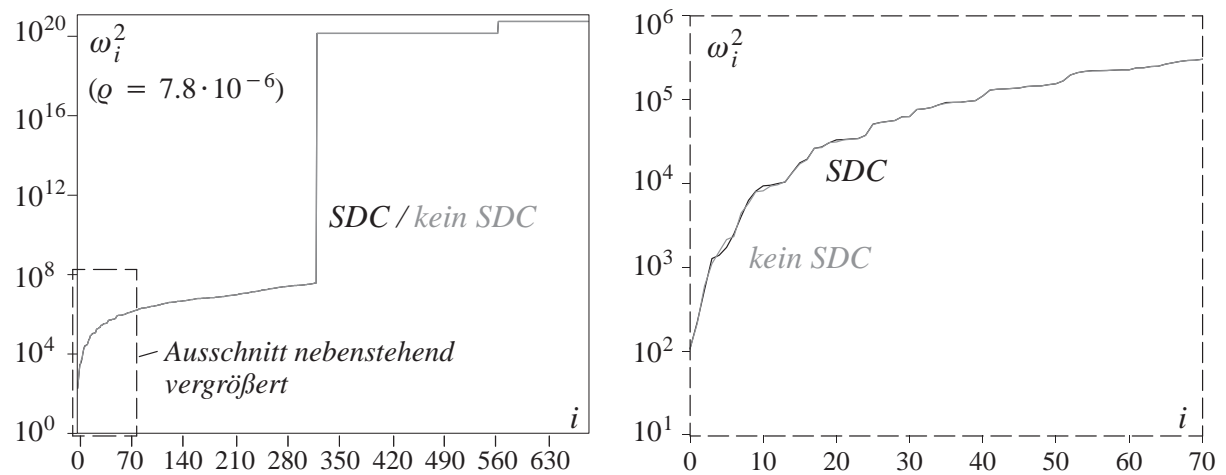
$$(\mathbf{K}_T^c - \omega^{2c} \mathbf{M}^c) \boldsymbol{\phi}^c = 0 \quad , \quad \boldsymbol{\phi}^c \neq 0 \quad (5.30)$$

beziehungsweise

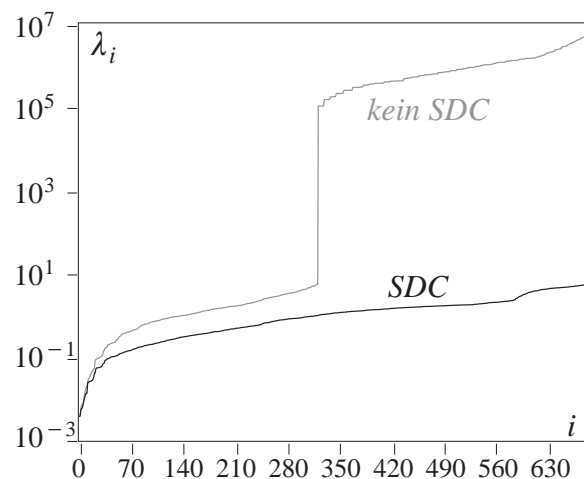
$$(\mathbf{K}_T - \omega^2 \mathbf{M}) \boldsymbol{\phi} = 0 \quad , \quad \boldsymbol{\phi} \neq 0 \quad (5.31)$$

für die Quadratplatte aus Abb. 5.1 mit und ohne SDC gelöst und die Spektren der Eigenwerte $\omega_i^2, \omega_i^{2c}$ in Abb. 5.10a) überlagert.

a) dynamisches Eigenwertspektrum



b) Eigenwertspektrum der effektiven Steifigkeitsmatrix $(\hat{\mathbf{K}}_T^c - \lambda \mathbf{I}) \boldsymbol{\phi}^c = 0$



$$\hat{\mathbf{K}}_T^c = \frac{2}{\Delta t^2} \mathbf{M}^c + \frac{1}{2} \mathbf{K}_T^c$$

mit $\Delta t = 0.05$

$$\rho = 7.8 \cdot 10^{-6}$$

Abb. 5.10: dynamisches Eigenwertspektrum und Eigenwertspektrum der effektiven Steifigkeitsmatrix der Quadratplatte mit / ohne SDC

Bis auf die in Abb. 5.10a) rechts erkennbaren leichten Abweichungen, die auf Rundungsfehler in der Eigenwertanalyse zurückgeführt werden können (die Breite des Spektrums übersteigt die Rechengenauigkeit deutlich), entspricht das dynamische Eigenwertspektrum mit SDC-Vorkon-

ditionierung demjenigen ohne SDC.

Das Eigenwertspektrum aus

$$(\hat{\mathbf{K}}_T^c - \lambda \mathbf{I}) \boldsymbol{\phi}^c = 0, \boldsymbol{\phi}^c \neq \mathbf{0} \quad (5.32)$$

der zugehörigen SDC-vorkonditionierten *effektiven* Steifigkeitsmatrix Gl. (2.67) der Generalized- α Zeitintegration (Chung und Hulbert (1993))

$$\hat{\mathbf{K}}_T^c = \mathbf{M}^c \frac{1 - \alpha_m}{\beta \Delta t^2} + (1 - \alpha_f) \mathbf{K}_T^c \quad (5.33)$$

ist für $\alpha_m = \alpha_f = 0.5$, $\beta = 0.25$ in Abb. 5.10b) dargestellt und mit dem entsprechenden Spektrum ohne SDC verglichen. Deutlich ist zu erkennen, dass das Spektrum der effektiven Steifigkeitsmatrix analog zum statischen Fall von der SDC-Vorkonditionierung profitiert, indem der Sprung zwischen den Membran- und den Querschub- und Dickenmoden verschwindet.

Auch bei dynamischen Simulationen ist somit der SDC-Ansatz eine reine Vorkonditionierung, die die spektralen Eigenschaften des resultierenden linearen Gleichungssystems verbessert, ohne jedoch das Ergebnis zu modifizieren.

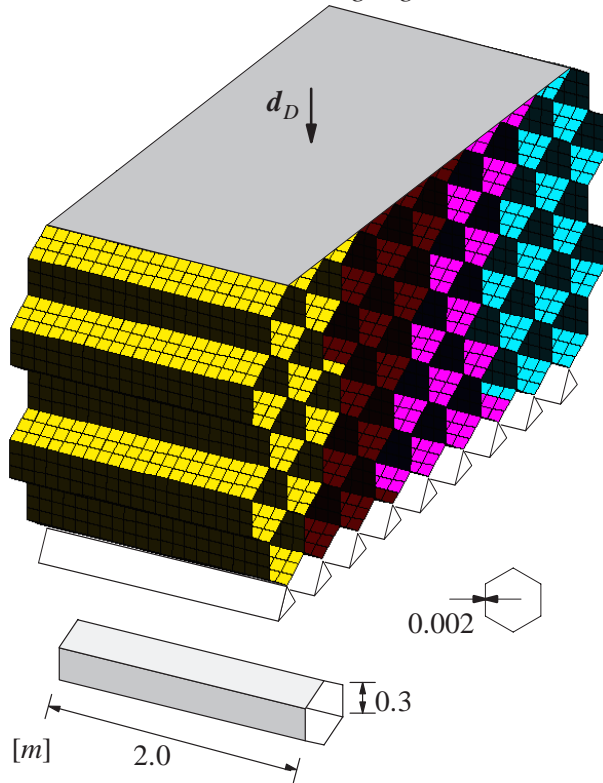
5.5 Beispiele

5.5.1 Wabenstruktur

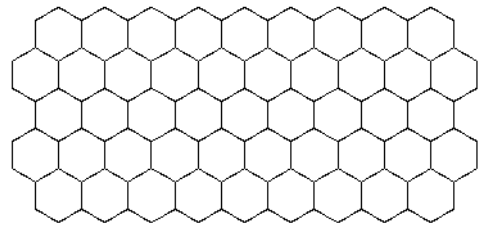
Anhand der in Abb. 5.11 dargestellten Wabenstruktur wird der Einfluss der SDC-Methode auf das iterative Lösungsverhalten gezeigt. Die Wabe wird durch eine vorgeschriebene Verschiebung zusammengedrückt. Es werden (hybride) bilineare Elemente der 7-Parameter-Schalenformulierung mit einer EAS-Anreicherung der Membranverzerrungen und einer ANS-Interpolation der Querschubverzerrungen verwendet. Die Lösung wird mit dem Generalized- α Zeitintegrationsverfahren mit 500 Zeitschritten bestimmt. Als Löser des linearen Gleichungssystems mit 56952 Unbekannten innerhalb der Newton-Gleichgewichtsiteration wird das parallele vorkonditionierte CG-Verfahren der 'AZTEC'-Bibliothek (Tuminaro et al. (1999)) verwendet.

Sechs Kombinationen von Vorkonditionierungen werden getestet und jeweils die Anzahl der benötigten Iterationen zum Erreichen des (von 'AZTEC' vorgegebenen) Abbruchkriteriums $\|\mathbf{r}\|_2 < 10^{-9}$, sowie die benötigte Lösungszeit des CG-Verfahrens über die gesamte Simulation summiert (Abb. 5.12).

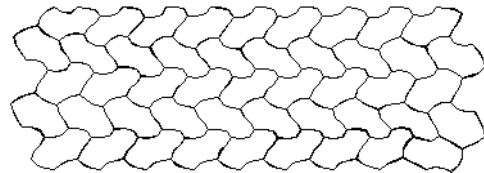
Geometrie und Randbedingungen



undeformierte Struktur



Deformation bei $d_D = 0.6$



Material :

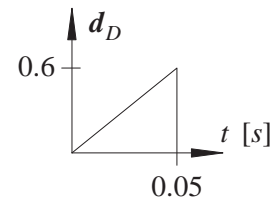
St.Venant – Kirchhoff

$$E = 2.06 \cdot 10^{11} \frac{N}{m^2}$$

$$\nu = 0.3$$

$$\rho = 8000 \frac{kg}{m^3}$$

Belastung :



$$\Delta t = 1 \cdot 10^{-4} \text{ s}$$

Abb. 5.11: Geometrie, Randbedingungen, Material und Belastung

Die sechs verwendeten Kombinationen von Vorkonditionierungen sind:

- SDC–Vorkonditionierung (optimaler Skalierungsfaktor ist $C = 50$)
- symmetrische Skalierung (Anhang A3.1)
- SDC und symmetrische Skalierung
- ASM–ILU(0)–Vorkonditionierung (Kap. 4.5.4) mit vier Teilgebieten
- SDC und ASM–ILU(0)–Vorkonditionierung
- SDC und symmetrische Skalierung und ASM–ILU(0)–Vorkonditionierung

In Abb. 5.12 lässt sich die Effizienz der SDC–Vorkonditionierung deutlich erkennen. Da SDC im Lösungsprozess selbst keine Kosten verursacht, ist die Reduktion der Lösungszeit proportional zur Abnahme der Iterationsanzahl. Zusätzliche symmetrische Skalierung (Abb. 5.12(c)) verringert die Iterationszeiten weiter und stellt die für dieses Beispiel schnellste Variante dar.

Die Varianten mit einer ASM–ILU(0)–Vorkonditionierung (Abb. 5.12(d) und (e)) führen zwar zu sehr niedrigen Iterationsanzahlen, die numerisch relativ teure Ermittlung und Anwendung der ILU–Faktoren lässt die absoluten Lösungszeiten jedoch hinter denen der sehr preiswerten Varianten Abb. 5.12(a) und (c) zurückbleiben. Der Grund hierfür ist, dass langwellige Biegemoden im Spektrum der Wabenstruktur kaum enthalten sind. Sind solche langwelligen Biegemoden

vorhanden, so ist der Einsatz von aufwendigeren Vorkonditionierungen wie ILU sinnvoll. Ein solches Beispiel wird in Kap. 6.6.2 gezeigt, wo der SDC–Ansatz mit Vorkonditionierungen auf der Basis von Ein– und Multilevel–Gebietszerlegungen kombiniert wird.

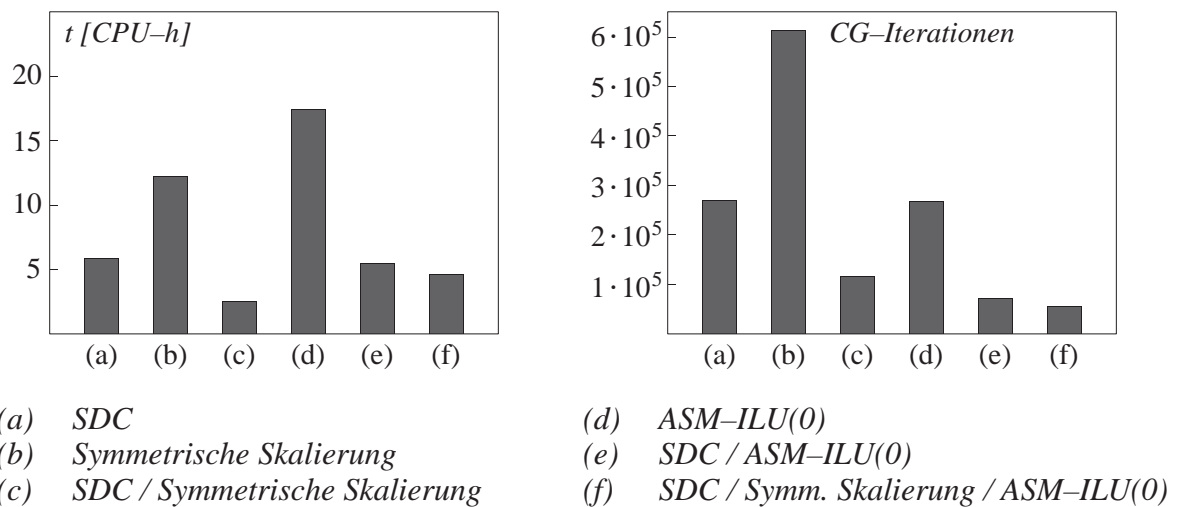


Abb. 5.12: Summierte Gleichungslösungszeiten und Iterationsanzahlen

5.5.2 Durchschlagen eines Kreiszyylindersegments

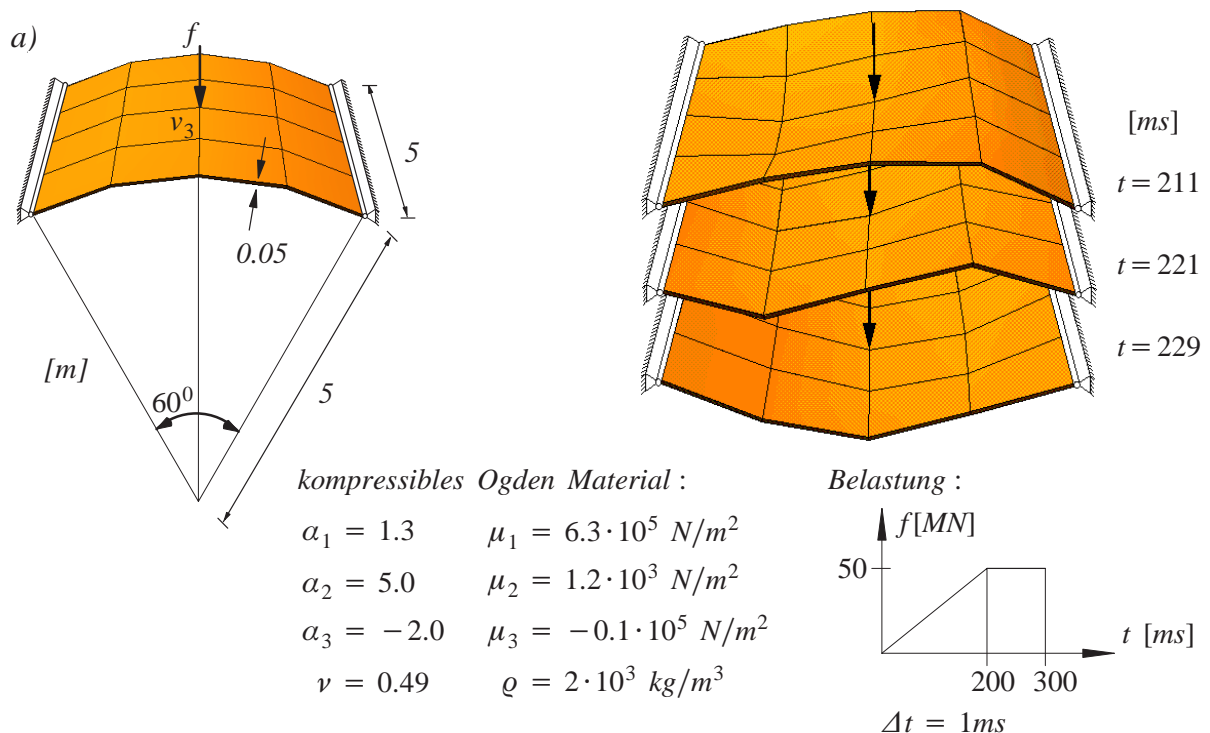
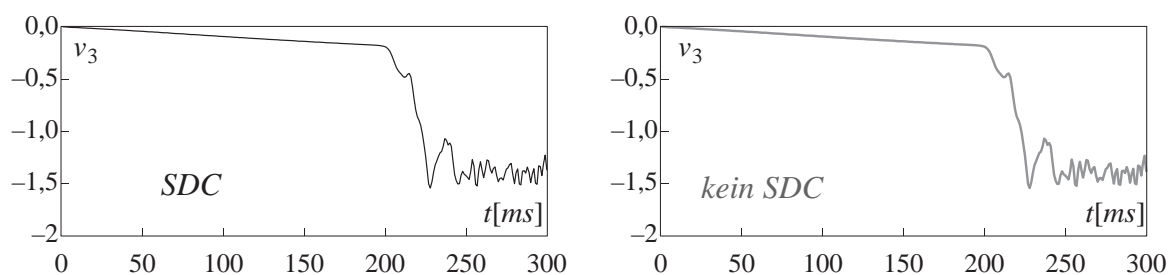


Abb. 5.13: Durchschlagen eines hyperelastischen Kreiszyylindersegments

In Abb. 5.13 ist ein dynamisches Durchschlagproblem eines Kreiszyylindersegments dargestellt, die Geometrie und Randbedingungen wurden Kuhl (1996) entnommen. Es wird ein kompressibles Ogden–Material (Ogden (1984), Holzapfel (2000)) sowie das Generalized– α Zeitintegrati-

onsverfahren verwendet. Es wird eine grobe Diskretisierung mit 16 hybriden bilinearen Schalelementen gewählt. Dies gewährleistet, dass die einzelnen Elemente ausreichend schlank sind um den Effekt der SDC-Vorkonditionierung studieren zu können, und es ermöglicht eine dissipationsfreie und trotzdem stabile Zeitintegration über den kurzen betrachteten Zeitraum von 300ms. Die dissipationsfreie Zeitintegration erlaubt den direkten Vergleich der Strukturantwort bei einer Simulation mit und ohne SDC-Vorkonditionierung im gesamten Spektrum der in der Strukturantwort enthaltenen Moden. Des Weiteren ist aufgrund der Grobheit der Diskretisierung die Lösung der linearisierten Gleichungssysteme mit dem CG-Verfahren *ohne* Vorkonditionierung zu Vergleichszwecken möglich.

a) *identischer Zeit-Verschiebungsverlauf des Lastangriffspunktes mit/ohne SDC*



b) *Anzahlen benötigter CG-Iterationen mit/ohne SDC*

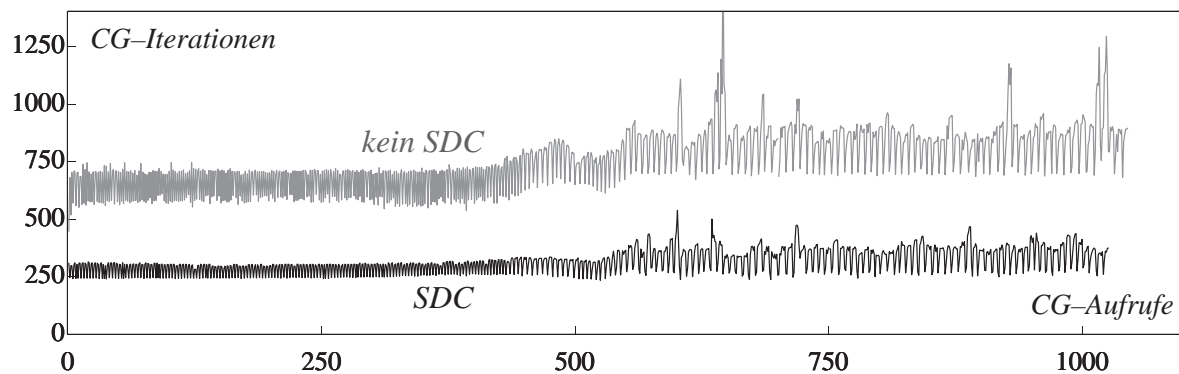


Abb. 5.14: *Verschiebung des Lastangriffspunktes und Anzahl der CG-Iterationen*

Als Konvergenzkriterium des CG-Verfahrens wurde $\| \mathbf{r} \|_2 < 10^{-9}$ von der verwendeten Löserbibliothek 'AZTEC' vorgegeben. Als Konvergenzkriterium der Newton-Iteration wird eine um die SDC-Skalierung bereinigte L_2 -Norm der residuellen Verschiebungen verwendet.

In Abb. 5.14a) ist die vertikale Verschiebung des Lastangriffspunktes über die Zeit dargestellt. Abb. 5.14a) links zeigt den Verlauf der Vertikalverschiebung des Lastangriffspunktes mit SDC, auf der rechten Seite ist der Verschiebungsverlauf ohne SDC-Vorkonditionierung dargestellt. Die Verläufe sind im Rahmen der Rechengenauigkeit identisch, die SDC-Vorkonditionierung modifiziert das dynamische Strukturverhalten nicht. Abb. 5.14b) zeigt die Anzahlen der benötigten CG-Iterationen der einzelnen Newton-Schritte über den betrachteten Zeitraum. Die mit

SDC erzielte Reduzierung der Iterationen (und der hierzu proportionalen Verringerungen der Lösungszeiten) ist deutlich erkennbar.

5.5.3 Rohr unter Gleichgewichtslastgruppe

Als drittes dynamisches Beispiel wird das Beulen eines dünnen Rohres unter einer Gleichgewichtsgruppe aus Flächenlasten untersucht. Da an diesem Beispiel auch die Kombination aus SDC- und Multigrid-Vorkonditionierung demonstriert wird, wird es in Kap. 6.6.2 gezeigt, nachdem in Kap. 6.5 die für diese kombinierte Vorkonditionierung nötigen Anpassungen der Multigrid-Vorkonditionierung behandelt wurden.

6 Multigrid–Vorkonditionierung

'So, what else can go wrong with AMG? – Ouch! Thin body elasticity!'
Van Emden Henson's Algebraic Multigrid Tutorial,
Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, Colorado 1999.
www.mgnet.org/mgnet-tuts.html

In der wohl ersten Publikation zu Multigrid–Lösungsmethoden führte Fedorenko (1964) für die Lösung der Wärmeleitungsgleichung auf einem Einheitsquadrat mit der Methode der Finiten Differenzen eine zweite, gröbere Diskretisierung zur Konvergenzbeschleunigung ein. Er konnte zeigen, dass mit seiner Methode die benötigte Anzahl Operationen zur Erreichung einer fixen Genauigkeit $o(N)$ beträgt. Bis heute gibt es keine anderen Lösungsmethoden, die eine solche Ordnung aufweisen können. Die Aufmerksamkeit, die den Multigrid–Methoden speziell im Bereich der Lösung partieller Differentialgleichungen zukommt, ist daher seit Mitte der 1970er Jahre exponentiell gestiegen. Erste Beiträge, die große Beachtung gefunden haben, waren beispielsweise Brandt (1977) und Hackbusch (1976). Die Publikationen zum Thema sind heute kaum mehr überschaubar. Darum sollen hier lediglich einige grundlegende Werke wie Hackbusch (1985), Wesseling (1992), Briggs (2000), Braess (1995), McCormick (1986) genannt, sowie auf weiterführende Quellen darin verwiesen werden.

Multigrid– beziehungsweise Multilevel–Methoden werden üblicherweise in zwei Klassen unterschieden. Dies sind zum einen die 'klassischen', *geometrischen* Multigrid–Methoden und zum anderen die sogenannten *algebraischen* Multigrid–Methoden.

Die geometrischen Multigrid–Methoden verwenden neben einer gegebenen räumlichen Feindiskretisierung eine oder mehrere zusätzliche Grobdiskretisierungen. Ein solcher Ansatz wird im folgenden Kap. 6.1 zur Einführung in die Thematik verwendet. Einen Überblick über geometrische Multigrid–Methoden findet man in Wesseling (1992), Bramble (1994) und Hackbusch (1985). Als Einführung sind auch Briggs et al. (2000), Smith et al. (1996), Adams (1998), (2000) und (2002), Go (1999) sowie Brezina (1997a) geeignet.

Algebraische Multigrid–Methoden sind erstmals Anfang der 1980er Jahre aufgetreten (frühe Veröffentlichungen sind Brandt et al. (1982), Ruge (1986), Ruge und Stüben (1986)). In der strengen Begriffsdefinition verwenden diese neben der Systemmatrix auf der Basis der Feindiskretisierung keinerlei zusätzliche geometrische Informationen zur Konstruktion von Grobleveln. Eine gute Einführung findet man bei Wagner (1998) und Briggs et al. (2000), einen Überblick über algebraische Multigrid–Methoden geben Briggs (2000), Wagner (1998), Brezina (1997a), Go (1999) und Stüben (2001).

Als *semi–algebraische* Ansätze werden Methoden bezeichnet, die keine expliziten geometrischen Grobgitter verwenden oder erzeugen, bei denen jedoch neben der Koeffizientenmatrix

selbst auch die Geometrie der Feindiskretisierung in die Konstruktion der Multigrid–Vorkonditionierung eingeht. Zu dieser Klasse gehören auch die ab Kap. 6.4 vorgestellten Varianten des Aggregations–Multigrid nach Braess (1995) und Vanek et al. (1996), Brezina und Vanek (1997b), Mandel et al. (1999), Vanek et al. (1999) und (2001) und Fish et al. (1997).

6.1 Einführung

6.1.1 Glatte Fehleranteile

Es soll ein Fehler \bar{e} , wie in Abb. 6.1 schematisch dargestellt, betrachtet werden, der über ein Teilgebiet $\Omega_i \subset \Omega$ konstant ist.

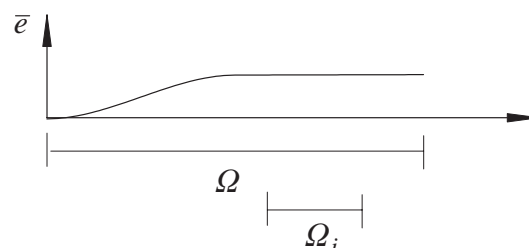


Abb. 6.1: konstanter Fehler in einem Teilgebiet

Dieser Fehlerverlauf impliziert, dass sich in Ω_i keine physikalischen Dirichlet–Randbedingungen befinden, da an ihnen der Fehler definitionsgemäß Null ist.

Bei Koeffizientenmatrizen A , die aus einer Finite–Elemente–Diskretisierung einer elliptischen Differentialgleichung resultieren, ist die Zeilensumme

$$\sum_{q=1}^N A_{pq} = 0, \quad (6.1)$$

wenn Zeile p zu einem Freiheitsgrad eines Knotens einer Diskretisierung von Ω gehört, der nicht in unmittelbarer topologischer Nachbarschaft zu einem physikalischen Dirichlet–Rand liegt. Dies ist für alle Unbekannten innerhalb des Teilgebietes Ω_i gegeben. Eine ASM–Teilgebietskorrektur auf Ω_i des glatten Fehlers \bar{e} lautet dann:

$$\bar{z} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ & & (A^{\Omega_i})^{-1} \\ & & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \end{bmatrix} A \bar{e}. \quad (6.2)$$

Das Produkt $A \bar{e}$ hierin ist aufgrund Gl. (6.1) Null für alle Unbekannten des Teilgebietes Ω_i :

$$A^{\Omega_i} \bar{e}^{\Omega_i} = \mathbf{0}. \quad (6.3)$$

Eine ASM–Teilgebietskorrektur kann somit konstante Fehleranteile auch bei vollständiger Teilgebietslösung nicht reduzieren:

$$\bar{z}^{\Omega_i} = \mathbf{0} \quad \text{für } \bar{e} = \text{konstant in } \Omega_i . \quad (6.4)$$

Dementsprechend werden auch Fehleranteile mit geringem räumlichen Gradienten nur sehr schlecht reduziert. Solche Fehleranteile können als *geometrisch glatt* bezeichnet werden. Eine detailliertere Diskussion geometrisch glatter Fehler an einem Modellproblem findet man in Hackbusch (1985) und Briggs (2000).

Neben dieser geometrisch motivierten Betrachtung glatter Fehleranteile kann auch eine rein algebraische Betrachtung der 'Glattheit' von Fehlerkomponente erfolgen. Wie bereits in Kap. 4.4.1 gezeigt, können Vorkonditionierungen auf der Basis additiver Zerlegung der Koeffizientenmatrix (Jacobi– und Gauss–Seidel– verwandte Methoden sowie Schwarzsche Gebietszerlegungen) kurzweilige Fehleranteile leicht eliminieren, während langweilige Fehleranteile kaum reduziert werden. Man kann daher einen Fehler als glatt bezeichnen, wenn eine Iteration mit einer solchen Vorkonditionierung nur noch eine geringe oder keine Reduktion des Fehlers erzielt. Die Fehlerentwicklung bei einer stationären, vorkonditionierten Richardson–Iteration Gl. (4.18) ist:

$$\mathbf{e}^{k+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A})\mathbf{e}^k . \quad (6.5)$$

Langsam konvergierende, *algebraisch glatte* Fehleranteile \bar{e} ändern sich nicht oder kaum während der Iteration:

$$\bar{e} \approx (\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}) \bar{e} , \quad (6.6)$$

beziehungsweise

$$\mathbf{0} \approx \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A} \bar{e} . \quad (6.7)$$

Die Aussagen Gl. (6.6) und (6.7) sind äquivalent zu

$$\|\bar{e}\|_A \approx \|(\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}) \bar{e}\|_A , \quad (6.8)$$

beziehungsweise

$$\|\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A} \bar{e}\|_A \approx 0 . \quad (6.9)$$

Für beliebige \mathbf{M}^{-1} muss daher $\mathbf{A} \bar{e} \approx \mathbf{0}$ gelten, woraus folgt:

$$\mathbf{0} \approx \mathbf{A} \bar{e} \quad (6.10)$$

$$\Rightarrow 0 \approx \bar{e}^T \mathbf{A} \bar{e} \quad (6.10)_1$$

$$\Rightarrow 0 \approx \|\bar{e}\|_A \quad (6.10)_2$$

Es sind also vor allem die niedrig–energetischen Fehleranteile, die mit den üblichen Vorkonditionierungsmethoden nur schwer reduziert werden können. Gl. (6.10)₂ dient als algebraische

Auffassung von Glattheit. Man beachte, dass sich diese von einer geometrischen Auffassung von Glattheit unterscheiden kann. Bei großen betragsmäßigen Sprüngen in den Koeffizienten von A (zum Beispiel durch Anisotropie, Lokalisierungsphänomenen oder Strukturen, die aus weichen/dünnen und steifen/dicken Bauteilen bestehen) kann ein Fehler, der nach Gl. (6.10)₂ als algebraisch glatt gilt, geometrisch betrachtet durchaus kurzweilig sein. Ein solches Modellbeispiel wird in Briggs (2000) gegeben.

6.1.2 Einfaches Beispiel

Es wird das Beispiel des Kragarms aus Abb. 4.4 erneut aufgegriffen, um die Wirkungsweise von Multilevel-Methoden zu erläutern. Diesmal wird für die iterative Lösung ein Startvektor $\mathbf{d}_{v_3}^0$ vorgegeben, der in der z -Komponente der Mittelflächenverschiebung einen Fehler

$$e_{v_3}(x_n, \lambda_w) = \begin{cases} \frac{a_1}{250}x_n + a_2 \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_w}x_n\right) & , x_n \leq 250 \text{ mm} \\ a_1 + a_2 \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_w}x_n\right) & , x_n > 250 \text{ mm} \end{cases} \quad n = 1, \dots, N_{nd} \quad (6.11)$$

mit Wellenlänge und Amplituden

$$\lambda_w = 5 \cdot 10^1 \quad ; \quad a_1 = \frac{2}{5} \max_n(v_3) = 77.4 \text{ mm} \quad ; \quad a_2 = \frac{1}{5} \max_n(v_3) = 38.7 \text{ mm} \quad (6.12)$$

enthält. Mit dem Fehlervektor nach Gl. (4.36)₁ ergibt sich der Startvektor zu

$$\mathbf{d}_{v_3}^0 = \mathbf{d} + \mathbf{e}_{v_3} . \quad (6.13)$$

Der Fehler \mathbf{e}_{v_3} im Startvektor ist in Abb. 6.2a) als Deformation des Kragarms visualisiert. Er setzt sich aus einer kurzweiligen und einer abschnittsweise linearen und konstanten Fehlerkomponente zusammen. Nach den Ausführungen in Kap. 4.5.5 wird erwartet, dass die kurzweilige Fehlerkomponente leicht mit einer Gebietszerlegungsvorkonditionierung reduziert werden kann, während der lineare und vor allem der konstant verlaufende Fehleranteil nur langsam reduziert wird.

Zusätzlich zu der bereits in Kap. 4.4.1, Abb. 4.4 verwendeten Diskretisierung, die hier als 'feine' Diskretisierung $\Omega_{(0)}$ bezeichnet werden soll, wird eine zweite, 'grobe' Diskretisierung $\Omega_{(1)}$ mit Steifigkeitsmatrix $A_{(1)}$ eingeführt (Abb. 6.2b)). Im Weiteren bezeichnet ein Index in Klammern $(\cdot)_{(l)}$ oder $(\cdot)^{(l)}$ Größen, die mit einer Diskretisierung $\Omega_{(l)}$ assoziiert sind.

Auf $\Omega_{(0)}$ wird nun eine ASM-Vorkonditionierung (Kap. 4.5.3) mit den in Abb. 6.2b) dargestellten drei Teilgebieten $\Omega_{(0)i}$, $i = 1, 2, 3$ durchgeführt:

$$\mathbf{z}_{(0)}^1 = \mathbf{M}_{(0)ASM}^{-1} \mathbf{r}_{(0)}^0 = \mathbf{M}_{(0)ASM}^{-1} \left(\mathbf{f}_{(0)} - \mathbf{A}_{(0)} \mathbf{d}_{v_3}^0 \right) . \quad (6.14)$$

Als Teilgebietslösung wird eine unvollständige Faktorisierung $\mathbf{M}_{ILU(1)}^{-1}$ verwendet. Der nach der Vorkonditionierung verbleibende Fehler $\mathbf{e}_{(0)}^1$ ist in Abb. 6.3a) als Deformation des Kragarms dar-

gestellt, der geometrisch glatte Fehleranteil bleibt dabei weitestgehend erhalten, der hochfrequente Fehleranteil wird annähernd vollständig eliminiert.

a) Fehler e_{v_3} des Startvektors



b) feine Diskretisierung (2404 Unbekannte) und grobe Diskretisierung (62 Unbekannte)

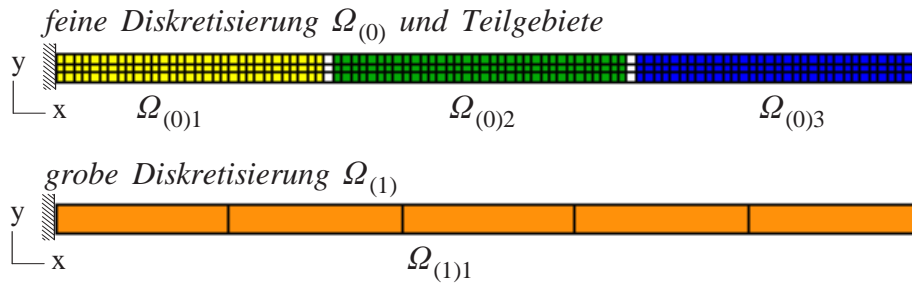


Abb. 6.2: Initialer Fehler und Fein- und Grobdiskretisierung des Kragarms

In $\Omega_{(0)1}$ stellt sich ein näherungsweise linearer, in $\Omega_{(0)2}$ und $\Omega_{(0)3}$ ein annähernd konstanter verbleibender Fehlerverlauf ein.

Dieser verbleibende Fehler $e_{(0)}^1$ (Abb. 6.3a)) kann aufgrund seiner Glattheit mit einer weniger feinen Diskretisierung $\Omega_{(1)}$ gut approximiert werden. Die Grobdiskretisierung $\Omega_{(1)}$ (Abb. 6.2b)) wird nun im Rahmen der Schwarzschen Gebietszerlegung als weiteres überlappendes Teilgebiet eingeführt. Anders als die Teilgebiete von $\Omega_{(0)}$ umfasst $\Omega_{(1)}$ das Gesamtsystem.

Man beachte, dass $\Omega_{(1)}$ keine konforme Vergrößerung der Diskretisierung $\Omega_{(0)}$ darstellt. Die zu $\Omega_{(1)}$ gehörende Restriktionsmatrix, die einen Vektor diskreter Knotenwerte von $\Omega_{(0)}$ auf $\Omega_{(1)}$ abbildet, wird in Analogie zu Gl. (4.48) als Restriktion $\mathbf{R}_{(0)}^{(1)} \in \mathbb{R}^{N_{(1)} \times N_{(0)}}$ bezeichnet. Sie enthält hier jedoch als Zeilen die an den Knotenpunkten von $\Omega_{(0)}$ ausgewerteten Finite-Element-Ansatzfunktionen der Elemente von $\Omega_{(1)}$. $\mathbf{R}_{(0)}^{(1)}$ ist daher eine lineare Interpolation, welche die wohl einfachste Möglichkeit der Konstruktion eines Transferoperators zwischen nichtkonformen Diskretisierungen darstellt.

Restriktiert man das nach der Feingittervorkonditionierung Gl. (6.14) verbleibende Residuum $\mathbf{r}_{(0)}^1 = \mathbf{r}_{(0)} - \mathbf{A}_{(0)} \mathbf{z}_{(0)}^1$ auf $\Omega_{(1)}$, so erhält man:

$$\mathbf{r}_{(1)}^1 = \mathbf{R}_{(0)}^{(1)} \mathbf{r}_{(0)}^1 . \quad (6.15)$$

Der zugehörige Fehler $e_{(1)}^1$ ist in Abb. 6.3b) dargestellt. Die Korrektur auf der groben Diskretisierung wird nun ebenfalls mit einer ILU(1)-Vorkonditionierung vorgenommen:

$$\mathbf{z}_{(1)}^2 = \mathbf{M}_{(1)ILU}^{-1} \mathbf{r}_{(1)}^1 . \quad (6.16)$$

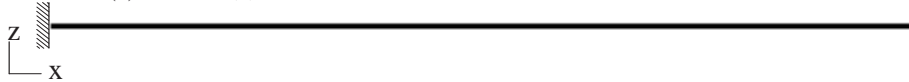
a) Fehler $e_{(0)}^1$ nach ASM – ILU(1) – Vorkonditionierung



b) Fehler $e_{(1)}^1$ (Projektion von Fehler $e_{(0)}^1$ auf $\Omega_{(1)}$)



c) Fehler $e_{(1)}^2$ auf $\Omega_{(1)}$ nach ILU(1) – Vorkonditionierung



d) Fehler $e_{(0)}^2$ auf $\Omega_{(0)}$ nach Grobgitterkorrektur

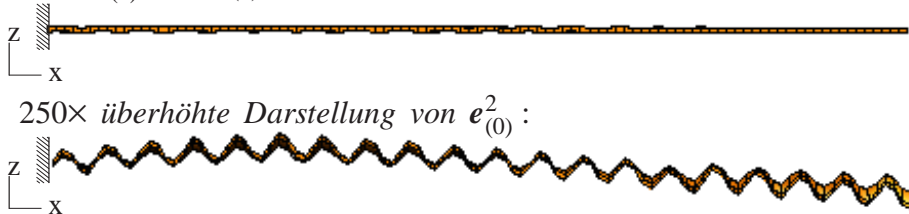


Abb. 6.3: Fehlerverläufe nach Fein- und Grobgittervorkonditionierung

In Abb. 6.3c) ist der Fehler $e_{(1)}^2$ auf $\Omega_{(1)}$ nach dieser Grobgitterkorrektur visualisiert. Der langwellige Fehleranteil ist beinahe vollständig eliminiert. Mittels der Prolongationsmatrix

$$\mathbf{P}_{(0)}^{(1)} = \left(\mathbf{R}_{(0)}^{(1)} \right)^T \quad (6.17)$$

wird die Grobgitterkorrektur $z_{(1)}^2$ im Sinne einer Schwarzschen Teilgebietskorrektur zurück auf $\Omega_{(0)}$ projiziert:

$$\mathbf{z} = \mathbf{z}_{(0)}^2 = \mathbf{z}_{(0)}^1 + \mathbf{P}_{(0)}^{(1)} \mathbf{z}_{(1)}^2 . \quad (6.18)$$

Es verbleibt der in Abb. 6.3d) dargestellte Fehlerverlauf. Deutlich ist zu erkennen, dass der lineare und konstante Fehleranteil durch die Überlagerung der Grobgitterkorrektur beinahe vollständig beseitigt wird. Eine solche *Mehrgitter-* oder *Multilevel-Vorkonditionierung* ist somit in der Lage, problematische glatte, langwellige Fehleranteile wirkungsvoll zu reduzieren.

Die hier am Beispiel des Kragarms durchgeführte Zweilevel-Vorkonditionierung ist formal eine überlappende Multiplikative-Schwarzsche-Gebietszerlegung mit nichtkonformen Diskretisierungen $\Omega_{(0)}$ und $\Omega_{(1)}$ und unvollständiger Teilgebietslösung für diese beiden Teilgebiete. Die Teilgebietslösung von $\Omega_{(0)}$ wurde näherungsweise mit einer ASM-Vorkonditionierung erstellt, während für das Teilgebiet $\Omega_{(1)}$ eine Näherungslösung mit einer ILU(1)-Vorkonditionierung ermittelt wurde.

Die Teilgebietslösung auf $\Omega_{(1)}$ sorgt hier mit verhältnismäßig niedrigem Aufwand für eine Art 'globalen Blick' auf die Lösung, der auf der feinen Diskretisierung nur mit deutlich höherem Aufwand erzielt werden kann.

Bei größeren Diskretisierungen und komplexeren Geometrien kann eine Hierarchie mehrerer Groblevel verwendet werden, was zu den im folgenden behandelten *Multilevel*- und *Multigrid*-Vorkonditionierungsmethoden führt.

6.2 Multilevel–Schwarzsche–Gebietszerlegungsmethoden

6.2.1 Bezeichnungen

L sei die Anzahl der verwendeten zusätzlichen Level $\Omega_{(l)}$, $l = 1, \dots, L$ ohne die ursprüngliche, feine Diskretisierung $\Omega_{(0)}$ selbst, so dass sich insgesamt $L + 1$ Level ergeben. Ein in Klammern stehender Index $(\cdot)_{(l)}$ kennzeichnet Größen, die sich auf ein Level l , $l = 0, \dots, L$ beziehen.

Anmerkung: Der Ausdruck 'Level' wird hier der Bezeichnung 'Gitter' oder 'Diskretisierung' vorgezogen, da im weiteren Verlauf von Kap. 6 noch Ansätze vorgestellt werden, die eine algebraische Multilevel–Vorkonditionierung ermöglichen, ohne dass Grobdiskretisierungen explizit erstellt werden.

Mit $\mathbf{R}_{(l-1)}^{(l)} \in \mathbb{R}^{N_{(l)} \times N_{(l-1)}}$, $l = 1, \dots, L$ wird die Restriktionsmatrix bezeichnet, die diskrete Knotenwerte von Level $\Omega_{(l-1)}$ auf das nächst gröbere Level $\Omega_{(l)}$ abbildet. Die Prolongationsmatrix

$$\mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)} = \left(\mathbf{R}_{(l-1)}^{(l)} \right)^T, \quad \mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)} \in \mathbb{R}^{N_{(l-1)} \times N_{(l)}} \quad (6.19)$$

vollzieht die Abbildung in umgekehrter Richtung.

Anmerkung: $\mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)}$ und $\mathbf{R}_{(l-1)}^{(l)}$ sind Prolongationen und Restriktionen zwischen Leveln $\Omega_{(l-1)}$ und $\Omega_{(l)}$. Diese sind nicht mit den Teilgebietsprolongationen und –restriktionen $\mathbf{P}_{(l)}^{\Omega_i}$, $\mathbf{R}_{(l)}^{\Omega_i}$ innerhalb eines Level $\Omega_{(l)}$ zu verwechseln.

Im Folgenden werden Restriktions- und Prolongationsmatrizen $\mathbf{R}_{(l-1)}^{(l)}$ und $\mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)}$ für $l = 1, \dots, L$ vorläufig als gegeben angenommen. Auf deren Konstruktion wird ab Kap. 6.3 eingegangen.

Wird die (effektive) Steifigkeitsmatrix durch

$$\mathbf{A}_{(l)} = \mathbf{R}_{(l-1)}^{(l)} \mathbf{A}_{(l-1)} \mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)}, \quad l = 1, \dots, L \quad (6.20)$$

gewonnen, so spricht man von einem Galerkin–Ansatz (Smith et al. (1996)). Dieser macht die Integration und Assemblierung der effektiven Steifigkeit $\mathbf{A}_{(l)}$ auf $\Omega_{(l)}$ überflüssig zu dem Preis, dass mit Gl. (6.20) ein unter Umständen sehr großes, dünnbesetztes doppeltes Matrix–Matrix–Produkt für jedes Level $\Omega_{(l)}$ ausgeführt werden muss. Der Galerkin–Ansatz der Groblevel–Steif-

figkeitsmatrizen entbindet jedoch von der Notwendigkeit, den Grobleveln eine reguläre Finite-Element-Diskretisierung zugrunde zu legen.

6.2.2 Multilevel-Additive-Schwarzsche-Gebietszerlegung (MASM)

Die wohl einfachste Multilevel-Vorkonditionierung ist die Multilevel-Additive-Schwarzsche-Gebietszerlegung (MASM). Sie wird hier behandelt, da sich an ihr sehr einfach der Zusammenhang zwischen Gebietszerlegungs- und Multigrid-Methoden demonstrieren lässt. Die von Dryja und Widlund (1991) vorgestellte MASM-Methode stellt eine allgemeine Basis einiger aktuell gebräuchlicher Multilevel-Vorkonditionierungstechniken wie der BPX-Vorkonditionierung (Bramble et al. (1990)), der Multilevel-Diagonalskalierung (Zhang (1991)), sowie der Hierarchische-Basen-Vorkonditionierung (Yserentant (1986a) und (1986b)) dar und ist somit von aktueller Bedeutung.

Die Einlevel-ASM-Vorkonditionierung lautet nach Gl. (4.60) mit Gl. (4.64):

$$\mathbf{M}_{(0)ASM}^{-1} = \sum_{i=1}^{N_{(0)}^p} \mathbf{P}_{(0)}^{\Omega_i} \left(\mathbf{M}_{(0)}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1} \mathbf{R}_{(0)}^{\Omega_i} . \quad (6.21)$$

Hierin sei $\left(\mathbf{M}_{(0)}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1} \approx \left(\mathbf{A}_{(0)}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1}$ eine beliebige sequentielle symmetrische Basisvorkonditionierung und $N_{(0)}^p$ die Anzahl Teilgebiete von $\Omega_{(0)}$.

Man erhält eine Zweilevel-ASM-Vorkonditionierung durch Hinzufügen einer Groblevelkorrektur im Sinne der ASM-Gebietszerlegung mit einem weiteren 'Teilgebiet' $\Omega_{(1)}$ mit Koeffizientenmatrix $\mathbf{A}_{(1)}$:

$$\mathbf{M}_{(0)MASM}^{-1} (L=1) = \sum_{i=1}^{N_{(0)}^p} \left(\mathbf{P}_{(0)}^{\Omega_i} \left(\mathbf{M}_{(0)}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1} \mathbf{R}_{(0)}^{\Omega_i} \right) + \mathbf{P}_{(0)}^{(1)} \mathbf{A}_{(1)}^{-1} \mathbf{R}_{(0)}^{(1)} . \quad (6.22)$$

Da $\mathbf{A}_{(1)} \in \mathbb{R}^{N_{(1)} \times N_{(1)}}$ verhältnismäßig groß sein kann, wird $\mathbf{A}_{(1)}^{-1}$ wiederum durch eine Zweilevel-ASM-Vorkonditionierung mit Groblevel $\Omega_{(2)}$ und Koeffizientenmatrix $\mathbf{A}_{(2)}$ angenähert:

$$\mathbf{A}_{(1)}^{-1} \approx \mathbf{M}_{(1)MASM}^{-1} (L=1) . \quad (6.23)$$

Einsetzen von Gl. (6.23) in (6.22) ergibt die Dreilevel-ASM-Vorkonditionierung:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{(0)MASM}^{-1} (L=2) = & \sum_{i=1}^{N_{(0)}^p} \left(\mathbf{P}_{(0)}^{\Omega_i} \left(\mathbf{M}_{(0)}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1} \mathbf{R}_{(0)}^{\Omega_i} \right) \\ & + \mathbf{P}_{(0)}^{(1)} \left[\sum_{m=1}^{N_{(1)}^p} \left(\mathbf{P}_{(1)}^{\Omega_m} \left(\mathbf{M}_{(1)}^{\Omega_{mm}} \right)^{-1} \mathbf{R}_{(1)}^{\Omega_m} \right) + \mathbf{P}_{(1)}^{(2)} \mathbf{A}_{(2)}^{-1} \mathbf{R}_{(1)}^{(2)} \right] \mathbf{R}_{(0)}^{(1)} . \end{aligned} \quad (6.24)$$

Die Näherung Gl. (6.23) lässt sich rekursiv für $A_{(2)}^{-1}$ in Gl. (6.24) und so fort wiederholen, bis ein größtes Level $\Omega_{(L)}$ mit der zugehörigen Koeffizientenmatrix $A_{(L)}$ erreicht ist, das für eine effiziente direkte Lösung klein genug ist.

Die rekursive Form der MASM–Vorkonditionierung mit L Groblevel ist dann:

$$\mathbf{M}_{MASM}^{-1}(L, \mathbf{r}^k, \mathbf{z}^k) : \quad (6.25)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{(0)} &\leftarrow \mathbf{r}^k \\ \mathbf{r}_{(1)} &= \mathbf{R}_{(0)}^{(1)} \mathbf{r}_{(0)} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (6.25)_1$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{(L)} &= \mathbf{R}_{(L-1)}^{(L)} \mathbf{r}_{(L-1)} \\ \mathbf{z}_{(l)} &= \sum_{i=1}^{N_{(l)}^p} \mathbf{P}_{(l)}^{\Omega_i} \left(\mathbf{M}_{(l)}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1} \mathbf{R}_{(l)}^{\Omega_i} \mathbf{r}_{(l)} \quad \forall l = 0, \dots, L-1 \end{aligned} \quad (6.25)_2$$

$$\mathbf{z}_{(L)} = \mathbf{A}_{(L)}^{-1} \mathbf{r}_{(L)} \quad (6.25)_3$$

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_{(L-1)} &\leftarrow \mathbf{z}_{(L-1)} + \mathbf{P}_{(L-1)}^{(L)} \mathbf{z}_{(L)} \\ &\vdots \\ \mathbf{z}_{(0)} &\leftarrow \mathbf{z}_{(0)} + \mathbf{P}_{(0)}^{(1)} \mathbf{z}_{(1)} \\ \mathbf{z}^k &\leftarrow \mathbf{z}_{(0)} \end{aligned} \quad (6.25)_4$$

In Gl. (6.25) wird das Residuum \mathbf{r} zunächst auf alle Groblevel abgebildet. Alle Teilgebietskorrekturen \mathbf{z} auf allen Leveln Gl. (6.25)₂ und (6.25)₃ können dann kommunikationslos parallel bestimmt werden. Danach werden die Teilgebietskorrekturen der einzelnen Groblevel auf das feinste Level prolongiert. Die Restriktionen der Residuen Gl. (6.25)₁ und die Prolongationen der Korrekturen Gl. (6.25)₄ sind rekursiv und müssen daher sequentiell durchgeführt werden.

Anmerkung: Für die MASM–Vorkonditionierung existiert auch eine geschlossene Darstellung, die eine parallele Durchführung der Restriktionen und Prolongationen erlaubt. Diese erfordert jedoch die explizite Bildung von zusammengesetzten Restriktionen

$$\tilde{\mathbf{R}}_{(0)}^{(l)} = \mathbf{R}_{(l-1)}^{(l)} \mathbf{R}_{(l-2)}^{(l-1)} \cdot \cdot \cdot \mathbf{R}_{(1)}^{(2)} \mathbf{R}_{(0)}^{(1)} \quad \forall l = 1, \dots, L, \quad (6.26)$$

sowie der Prolongationen $\tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)} = \tilde{\mathbf{R}}_{(0)}^{(l)T}$, die eine direkte Abbildung zwischen dem feinsten Level $\Omega_{(0)}$ und jedem größeren Level $\Omega_{(l)}$ darstellen. Die Produkte Gl. (6.26) sind jedoch für eine Implementierung ungeeignet. Die geschlossene Darstellung

$$\mathbf{M}_{MASM}^{-1}(L) = \sum_{l=0}^L \sum_{i=1}^{N_{(l)}^p} \tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)} \mathbf{P}_{(l)}^{\Omega_i} \left(\mathbf{M}_{(l)}^{\Omega_{ii}} \right)^{-1} \mathbf{R}_{(l)}^{\Omega_i} \tilde{\mathbf{R}}_{(0)}^{(l)}, \quad (6.27)$$

die mit Gl. (6.26) aus (6.25) abgeleitet werden kann, dient lediglich als Nachweis, dass es sich bei der rekursiven Form Gl. (6.25) tatsächlich um eine Additive–Schwarzsche–Gebietszerlegung nach Gl. (4.60) handelt (Smith et al. (1996)).

Die eingangs erwähnte Multilevel–Diagonalskalierung, die BPX–Vorkonditionierung und die Hierarchische–Basen–Vorkonditionierung ergeben sich aus Gl. (6.25) mit einer speziellen Wahl der Teilgebiete $\Omega_{(l),i}$, $l = 0, \dots, L$, $i = 1, \dots, N_{(l)}^P$. Für die Formulierung und einen Vergleich dieser Vorkonditionierungen sowie die zugehörigen Konvergenzanalysen wird auf Zhang (1991) und Smith et al. (1996) verwiesen.

6.2.3 Symmetrische Multilevel–MSM–Vorkonditionierung – Multigrid

Für eine parallele Umsetzung kann naheliegenderweise die Anzahl der Teilgebiete $N_{(0)}^P$ der Feindiskretisierung $\Omega_{(0)}$ der Anzahl der beteiligten Prozesse N^P entsprechend gewählt werden:

$$N_{(0)}^P = N^P . \quad (6.28)$$

Diese Wahl gewährleistet eine maximale Teilgebietsgröße (und entsprechende Konvergenzeigenschaften nach Gl. (4.66)). Die Anzahl $N_{(l)}^P$ der Teilgebiete der Groblevel $\Omega_{(l)}$ ist dann sinnvollerweise maximal so groß wie die Anzahl der Teilgebiete der Feindiskretisierung:

$$N_{(l)}^P \leq N_{(0)}^P = N^P \quad , \quad l = 1, \dots, L . \quad (6.29)$$

Dies bedeutet, dass die Teilgebietskorrekturen Gl. (6.25)₂ und (6.25)₃ jeweils parallel innerhalb eines Levels durchgeführt werden können, die einzelnen Level jedoch sequentiell bearbeitet werden. In Gl. (6.25)₂ ist der Index l somit sequentiell und der Index i parallel. Werden die Groblevelkorrekturen der einzelnen Level $\Omega_{(l)}$ ohnehin sequentiell ausgeführt, so kann für diese anstatt einer Additiv–Schwarzschen– eine Multiplikativ–Schwarzsche Formulierung – mit den besseren Konvergenzeigenschaften – verwendet werden. Die Parallelität wird dann mit dem ASM–Ansatz innerhalb der einzelnen Level eingebracht.

Da auch in diesem Fall die Vorkonditionierung im Rahmen eines CG–Verfahrens verwendet werden soll, wird die symmetrische Form der rekursiven Multilevel–Multiplikativen–Schwarzschen Gebietszerlegung (SMSM) verwendet, die in der Literatur in diesem Kontext auch als *Multigrid* (MG) bezeichnet wird.

Im Rahmen von Multigrid–Methoden werden unvollständige Lösungen $\mathbf{M}_{(l)}^{-1}$ auf den Leveln $\Omega_{(l)}$, $l = 0, \dots, L - 1$ verwendet, deren primäre Aufgabe nicht die Fehlerreduktion sondern die Fehlerglättung ist, um eine gute Approximation des verbleibenden Fehlers auf dem nächst–größeren Level zu gewährleisten. Man spricht daher in diesem Kontext von $\mathbf{M}_{(l)}^{-1}$ als einem *Glätter* (smoother) anstatt einer Vorkonditionierung. Die eigentliche betragsmäßige Fehlerreduktion erfolgt auf dem größten Level (bei deutlich weniger Unbekannten und folglich stark reduziertem Aufwand) durch eine vollständige Lösung mittels beispielsweise einer direkten Lösungsme-

thode. Mit $\mathbf{M}_{(l)ASM}^{-1}$ als Glätter auf Level $\Omega_{(l)}$ lautet die aus der symmetrisierten MSM–Vorkonditionierung Gl. (4.58) abgeleitete MG–Vorkonditionierung mit ASM–Glättern:

$$\mathbf{M}_{MG}^{-1}(L, \mathbf{r}^k, \mathbf{z}^k) : \quad (6.30)$$

$$\mathbf{r}_{(0)} \leftarrow \mathbf{r}^k$$

$$\mathbf{z}_{(0)} = \mathbf{M}_{(0)ASM}^{-1} \mathbf{r}_{(0)}$$

$$\mathbf{r}_{(1)} = \mathbf{R}_{(0)}^{(1)} \left(\mathbf{r}_{(0)} - \mathbf{A}_{(0)} \mathbf{z}_{(0)} \right) \quad (6.30)_1$$

$$\mathbf{z}_{(1)} = \mathbf{M}_{(1)ASM}^{-1} \mathbf{r}_{(1)} \quad (6.30)_2$$

⋮

$$\mathbf{r}_{(L)} = \mathbf{R}_{(L-1)}^{(L)} \left(\mathbf{r}_{(L-1)} - \mathbf{A}_{(L-1)} \mathbf{z}_{(L-1)} \right)$$

$$\mathbf{z}_{(L)} = \mathbf{A}_{(L)}^{-1} \mathbf{r}_{(L)} \quad (6.30)_3$$

$$\mathbf{z}_{(L-1)} \leftarrow \mathbf{z}_{(L-1)} + \mathbf{P}_{(L-1)}^{(L)} \mathbf{z}_{(L)}$$

$$\mathbf{z}_{(L-1)} \leftarrow \mathbf{z}_{(L-1)} + \mathbf{M}_{(L-1)ASM}^{-1} \left(\mathbf{r}_{(L-1)} - \mathbf{A}_{(L-1)} \mathbf{z}_{(L-1)} \right)$$

⋮

$$\mathbf{z}_{(0)} \leftarrow \mathbf{z}_{(0)} + \mathbf{P}_{(0)}^{(1)} \mathbf{z}_{(1)} \quad (6.30)_4$$

$$\mathbf{z}_{(0)} \leftarrow \mathbf{z}_{(0)} + \mathbf{M}_{(0)ASM}^{-1} \left(\mathbf{r}_{(0)} - \mathbf{A}_{(0)} \mathbf{z}_{(0)} \right) \quad (6.30)_5$$

$$\mathbf{z}^k \leftarrow \mathbf{z}_{(0)}$$

$$\mathbf{z}_{(l)} \leftarrow \text{MGV}(\mathbf{A}_{(l)}, \mathbf{r}_{(l)})$$

Wenn ein größeres Level $\Omega_{(l+1)}$ existiert

$$\mathbf{z}_{(l)} = \mathbf{M}_{(l)ASM}^{-1} \mathbf{r}_{(l)}$$

$$\mathbf{r}_{(l)} \leftarrow \mathbf{r}_{(l)} - \mathbf{A}_{(l)} \mathbf{z}_{(l)}$$

$$\mathbf{z}_{(l+1)} \leftarrow \text{MGV}(\mathbf{R}_{(l)}^{(l+1)} \mathbf{A}_{(l)} \mathbf{P}_{(l)}^{(l+1)}, \mathbf{R}_{(l)}^{(l+1)} \mathbf{r}_{(l)})$$

$$\mathbf{z}_{(l)} \leftarrow \mathbf{z}_{(l)} + \mathbf{P}_{(l)}^{(l+1)} \mathbf{z}_{(l+1)}$$

$$\mathbf{r}_{(l)} \leftarrow \mathbf{r}_{(l)} - \mathbf{A}_{(l)} \mathbf{z}_{(l)}$$

$$\mathbf{z}_{(l)} \leftarrow \mathbf{z}_{(l)} + \mathbf{M}_{(l)ASM}^{-1} \mathbf{r}_{(l)}$$

sonst

$$\mathbf{z}_{(l)} = \mathbf{A}_{(l)}^{-1} \mathbf{r}_{(l)}$$

Abb. 6.4: rekursive Funktion der Multigrid–Vorkonditionierung mit ASM–Glättung

Die Implementierung der MG–Vorkonditionierung erfolgt als rekursiv sich selbst rufende Funktion $z_{(l)} \leftarrow \text{MGV}(A_{(l)}, r_{(l)})$ wie in Abb. 6.4 dargestellt.

Diese Form wird auch als *V–Zyklus–Multigrid* bezeichnet. Abb. 6.5 zeigt schematisch die Restriktions-, Prolongations- und Glättungsschritte.

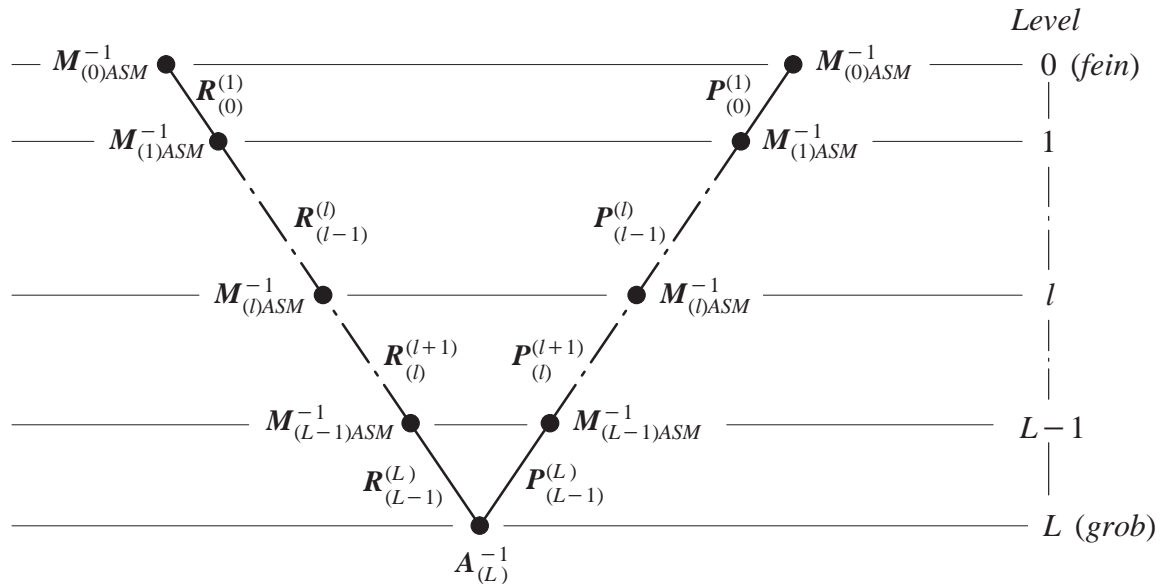


Abb. 6.5: V–Zyklus–Multigrid–Vorkonditionierung

Bis jetzt wurden die Interlevel–Transferoperatoren $R_{(l-1)}$ und $P_{(l-1)}$ als gegeben angenommen. Deren Konstruktion wird im folgenden behandelt.

6.3 Geometrischer Multigrid bei unstrukturierten Diskretisierungen

Bei geometrischen Mehrgittermethoden im Falle einer *strukturierten* Feindiskretisierung ist die Ermittlung von Grobdiskretisierungen als konforme Vergrößerung einer gegebenen Feindiskretisierung einfach durchzuführen. Hier soll jedoch keine Beschränkung auf solche strukturierten Diskretisierungen erfolgen. Die betrachteten Schalendiskretisierungen sind potentiell unstrukturiert, von komplexer Geometrie und komplexen Randbedingungen und haben unter Umständen eine inhomogene Netzdichte. Eine konforme Vergrößerung der bestehenden Feindiskretisierung ist daher im allgemeinen Fall nicht möglich.

Eine Möglichkeit ist die Generierung der Grobgitter durch das Finite–Element–Programm beziehungsweise durch den Anwender (vorausgesetzt dieser ist willens dies zu tun). Die zugehörigen Grobgittersteifigkeitsmatrizen können dann wahlweise durch Integration und Assemblierung der Grobgitter–Elemente oder als Galerkin–Grobgittersteifigkeiten Gl. (6.23) erstellt werden. Dies führt jedoch zu einer engen Verflechtung des Gleichungslösungsalgorithmus mit dem restlichen Finite–Element–Programm, was im Sinne eines modularen Programmaufbaus nicht wünschenswert ist. Auch hängt die Qualität der Vorkonditionierung von der Qualität und

Größe der Grobgitter ab, weswegen deren Generierung nicht dem Zufall – also dem Anwender – überlassen werden sollte. Geometrische Zwei- und Mehrgittermethoden mit dieserart generierten Diskretisierungen werden beispielsweise in Dracopoulos und Crisfield (1995), für nicht-lineare Probleme in Fish et al. (1995), sowie für Schalenprobleme in Fish et al. (1996) verwendet.

Eine zweite Möglichkeit ist die Generierung der Grobgitter durch den Lösungsalgorithmus selbst. Adams (1998) beschreibt ein Verfahren, bei der aus der Feindiskretisierung Knoten ausgewählt werden, die ein sogenanntes *Maximal Independent Set* (MIS) darstellen (siehe auch Saad (1996)).

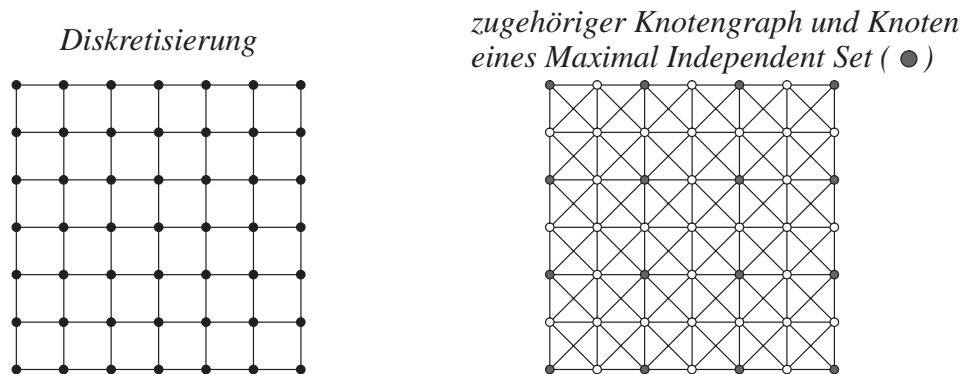


Abb. 6.6: Diskretisierung, Knotengraph und Maximal Independent Set

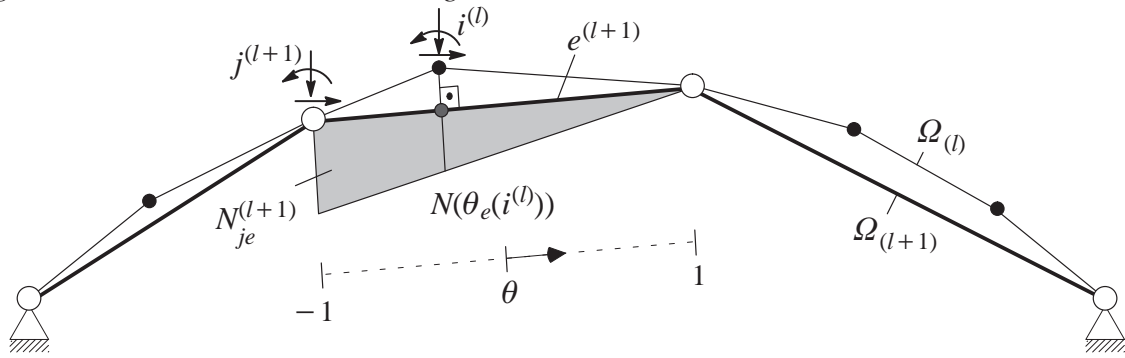
Betrachtet man den zur Feindiskretisierung gehörigen Knotengraphen, so ist ein MIS eine Untermenge von Knoten des Graphen, die nicht untereinander über eine Kante verbunden sind (Abb. 6.6) und die nicht durch Hinzufügen weiterer Knoten vergrößert werden kann. Die Knoten des MIS dienen dann bei Adams (1998) als Knotenpunkte einer Grobgittervernetzung.

Ist eine Grobdiskretisierung gefunden, so ist die wohl einfachste Konstruktion der Restriktion $\mathbf{R}_{(l)ji}^{(l+1)}$ die auf der Basis der Finite-Element-Ansatzfunktionen der Grobdiskretisierung. Sei $N_{je}^{(l+1)}(\boldsymbol{\theta}_e)$ die mit einem Grobgitterknoten $j^{(l+1)}$ assoziierte Ansatzfunktion auf dem Gebiet des Grobgitterelementes $e^{(l+1)}$ und $i^{(l)}$ ein Knoten der Feindiskretisierung, der in $e^{(l+1)}$ liegt. $N_{je}^{(l+1)}(\boldsymbol{\theta}_e)$ ist üblicherweise in normierten Elementkoordinaten $-1 \leq \boldsymbol{\theta}_e \leq 1$ gegeben. Der mit Knoten $j^{(l+1)}$ und $i^{(l)}$ assoziierte Knotenblock \mathbf{R}_{ji} in $\mathbf{R}_{(l)ji}^{(l+1)}$ hat die Dimension $N_{(l)}^{dof} \times N_{(l+1)}^{dof}$, wobei der Einfachheit halber angenommen werden soll, dass die Art und Anzahl der Freiheitsgrade am Knoten auf allen Gittern gleich ist: $N^{dof} = N_{(l)}^{dof} = N_{(l+1)}^{dof}$. Der Blockbeitrag des Knotens $i^{(l)}$ zu Knoten $j^{(l+1)}$ in der Restriktion ergibt sich dann mit \mathbf{I} als Einheitsmatrix zu:

$$\mathbf{R}_{(l)ji}^{(l+1)} = N_{je}^{(l+1)}(\boldsymbol{\theta}_{e(i^{(l)})}) \mathbf{I}, \quad \mathbf{I} \in \mathbb{R}^{N^{dof} \times N^{dof}}. \quad (6.31)$$

Abb. 6.7 zeigt dies am ebenen Beispiel eines gekrümmten Balkens, der mit linearen Elementen diskretisiert ist.

a) gekrümmter Balken, Diskretisierungen



b) Restriktion

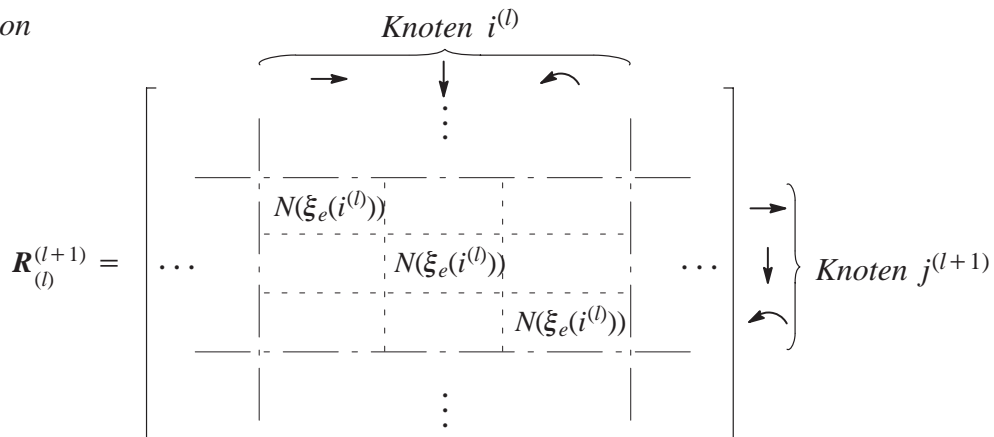


Abb. 6.7: gekrümmter Balken – Restriktion aus Grobgitteransatzfunktionen

Die Berücksichtigung der Dirichlet-Randbedingungen in der Restriktionsmatrix erfordert zusätzliche Überlegungen, auf die hier nicht weiter eingegangen wird.

Die Auswertung der Grobgitter-Ansatzfunktionen an den Orten der Feingitterknoten ist bei dreidimensionalen, dünnwandigen und gekrümmten Strukturen aufwendig:

- Es wird ein Suchalgorithmus benötigt, der zu einem gegebenen Grobgitterelement die darin enthaltenen Feingitterknoten bestimmt (Fish et al. (1996)).
Im Kontext der Kontaktformulierung für Schalen werden solche Suchalgorithmen in Kap. 7.9 behandelt.
- In der Regel ist der Diskretisierungsfehler in der Geometriebeschreibung durch das Fein- und Grobgitter unterschiedlich, so dass gegebenenfalls eine Art räumliche Projektion der Feingitterknoten auf die Elemente des Grobgitters durchgeführt werden muss (Abb. 6.7a).
- Die Koordinaten $\theta_e(i^{(l)}(\mathbf{x}))$ des Feingitterknotens im normierten Elementkoordinatensystem müssen über eine Invertierung der Elementansatzfunktionen $N_e^{(l+1)}(\theta_e)$ ermittelt werden. Diese Invertierung führt zu einem mindestens quadratischen Gleichungssystem für $\theta(i^{(l)})$, das am einfachsten mit einer Newton-It-

ration gelöst wird. Im Kontext der Kontaktformulierung für Schalen wird eine solche Invertierung in Kap. 7.9.3 behandelt.

Wegen der Neuvernetzung der Struktur zur Grobgridkonstruktion bei komplizierten Geometrien, der aufwendigen Konstruktion der Restriktionsmatrix und dem Verlust eines modularen Programmaufbaus wurde ein geometrischer Multigrid-Ansatz in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt. Geometrische Multigrid-Methoden für Schalenprobleme findet man beispielsweise in Adams (1998) und (2000), Fish et al. (1995) und (1996).

6.4 Aggregations-Multigrid

Aufgrund der vorbeschriebenen Schwierigkeiten bei der Erstellung von Grobdiskretisierungen bei komplexen Geometrien und Randbedingungen sollen Multilevel-Prinzipien ohne explizite Grobdiskretisierungen angewandt werden. Für die hier behandelten strukturdynamischen Probleme bietet sich ein algebraischer Multigrid-Ansatz auf der Basis von Aggregationsmethoden an (Braess (1995)). Es werden dabei Indizes des linearen Gleichungssystems zu zusammenhängenden sogenannten *Aggregaten* zusammengefasst, wobei je ein Aggregat auf dem algebraischen Groblevel wiederum durch einen Index repräsentiert wird. Die Interpolation zwischen einem Index des Groblevels und den Indizes des zugrundeliegenden Aggregates erfolgt mittels Grobgridansatzfunktionen, in deren Konstruktion die Geometrie der Feindiskretisierung in Form von Knotenkoordinaten eingeht.

Der verwendete Ansatz basiert im Wesentlichen auf dem sogenannten *Smoothed Aggregation Multigrid* (SAMG) von Vanek, Brezina und Mandel (Vanek et al. (1996), (1999) und (2001), Brezina (1997a) und Mandel et al. (1999)). In der Formulierung wird davon ausgegangen, dass der Koeffizientenmatrix des Gleichungssystems ein System gekoppelter elliptischer Differentialgleichungen zugrundeliegt. In der Strukturmechanik bedeutet dies, dass von einer statischen Problembetrachtung ausgegangen wird, bei der Starrkörperanteile an der Deformation keinen Beitrag zur Energienorm bezüglich der Koeffizientenmatrix liefern. Brezina und Vanek (1997b) zeigen jedoch die Anwendbarkeit auch auf andere Klassen von zugrundeliegenden Differentialgleichungen, weshalb der SAMG-Ansatz hier auch für strukturdynamische Probleme verwendet wird, bei denen Starrkörperanteile an einer Deformation (aufgrund der auftretenden Trägheitskräfte) nicht energiefrei sind.

Die Bestandteile des Smoothed-Aggregation-Multigrid werden in Kap. 6.4.1 anhand eines sehr einfachen eindimensionalen Modellproblems erläutert. In Kap. 6.4.2 wird die parallele Bildung der Aggregate behandelt, bevor in Kap. 6.4.3 die parallele Form des Smoothed-Aggregation-Multigrid für die 7-Parameter-Schalenformulierung angegeben wird. In Kap. 6.4.4 wird eine Variante des Ansatzes vorgestellt, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. In Kap. 6.5 werden die nötigen Modifikationen am SAMG-Ansatz zur Kombination mit dem SDC-Ansatz

aus Kap. 5 vorgestellt, bevor anhand von Beispielen in Kap. 6.6 die erzielten Konvergenzsteigerungen und verbesserten Lösungszeiten gezeigt werden.

Im Ausblick Kap. 6.7 werden Varianten und Ergänzungen des Aggregation–Multigrid aus der Literatur, die für eine Anwendung auf Schalenprobleme geeignet scheinen, genannt und kurz erläutert.

6.4.1 Eindimensionales Modellproblem

Eine Einführung in die Grundzüge des Smoothed–Aggregation–Multigrid wird anhand des in Abb. 6.8a) dargestellten eindimensionalen Modellproblems gegeben. Es handelt sich dabei um einen statisch betrachteten linear elastischen Dehnstab, der mit $N_{nd}^{(0)} = 12$ ungelagerten Knoten mit je einem Freiheitsgrad und $N_{el}^{(0)} = 12$ Elementen der Länge h diskretisiert ist und am freien Ende durch eine Einzellast P belastet wird. Man beachte, dass bei diesem eindimensionalen Fall die Anzahl der Freiheitsgrade mit der Anzahl der Knoten übereinstimmt:

$$N^{(0)} = N_{nd}^{(0)} . \quad (6.32)$$

Zunächst wird die Konstruktion der Prolongations– und Restriktionsmatrizen für ein algebraisches Groblevel $L = 1$ gezeigt, bevor die Verallgemeinerung für eine höhere Anzahl an Grobleveln gegeben wird. Es wird jedoch darauf geachtet, dass die verwendete Notation nicht auf den eindimensionalen Sonderfall beschränkt ist, sondern für die im Anschluss diskutierten dreidimensionalen Schalenprobleme Gültigkeit besitzt.

Mit E als E–Modul, A als Stabquerschnittsfläche und h als Elementlänge ergibt sich die Steifigkeitsmatrix $A_{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)} \times N^{(0)}}$ des Systems zu:

$$A_{(0)} = \frac{EA}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & & & -1 & 1 \end{pmatrix} , \quad A_{(0)} \in \mathbb{R}^{12 \times 12} . \quad (6.33)$$

Der diskretisierte Dehnstab $\Omega_{(0)}$ ist so gelagert, dass $A_{(0)}$ positiv–definit ist, wobei hier – um den Blick auf die Methode nicht zu verstellen – vorerst die Randbedingungen nicht näher betrachtet werden sollen.

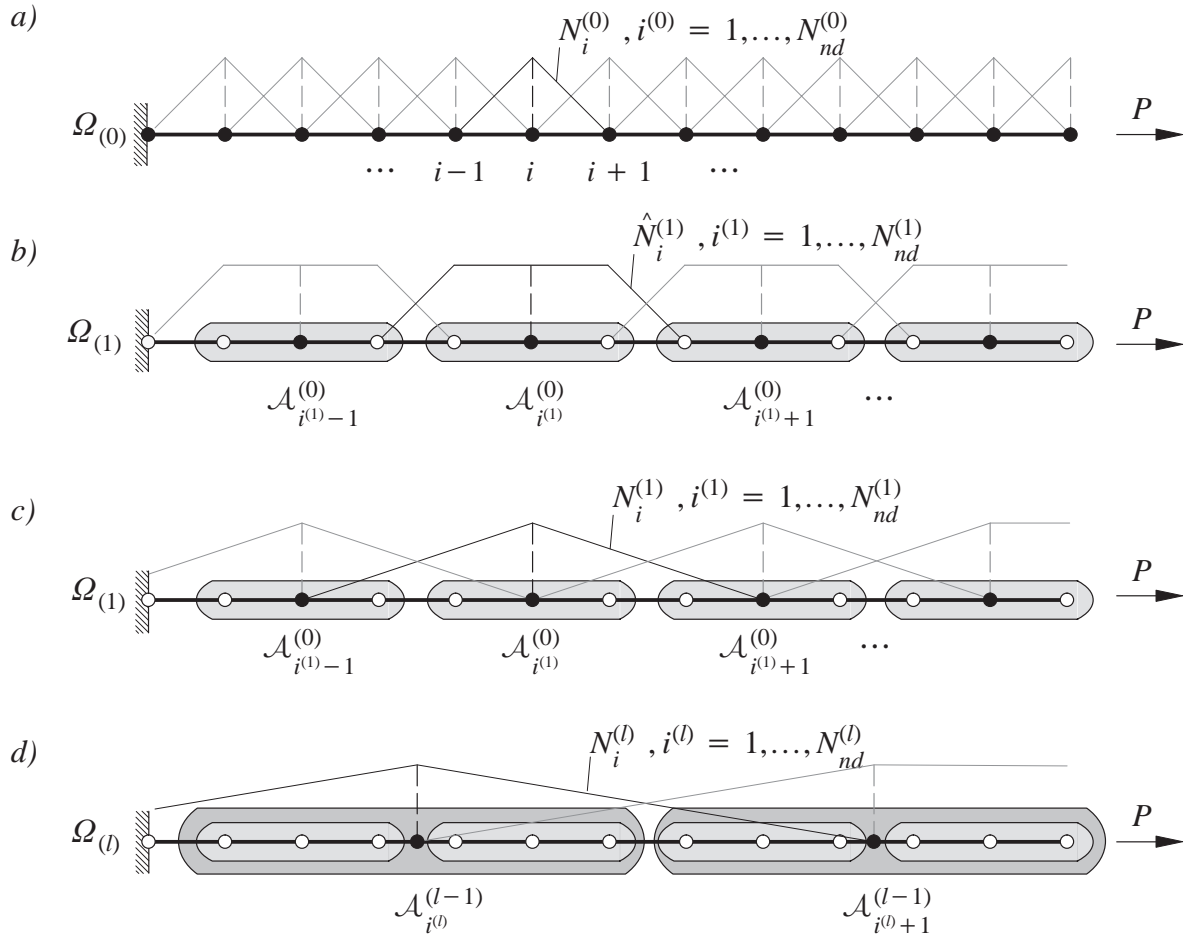


Abb. 6.8: eindimensionales Modellproblem – Aggregate und Ansatzfunktionen

Das lineare Gleichungssystem auf dem feinen Level $\Omega_{(0)}$ lautet:

$$\mathbf{A}_{(0)} \mathbf{d}^{(0)} = \mathbf{f}^{(0)} \quad , \quad \mathbf{A}_{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)} \times N^{(0)}} \quad , \quad \mathbf{d}^{(0)}, \mathbf{f}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)}} \quad , \quad (6.34)$$

beziehungsweise

$$\mathbf{A}_{(0)} \mathbf{e}^{(0)} = \mathbf{r}^{(0)} \quad , \quad \mathbf{e}^{(0)}, \mathbf{r}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)}} \quad . \quad (6.35)$$

Gl. (6.34) und (6.35) stellen mit $\mathbf{e}^{(0)} = \mathbf{d}^{(0)} - \mathbf{d}^{(0)0}$ bei einem Startvektor $\mathbf{d}^{(0)0} = \mathbf{0}$ für die iterative Lösung identische Gleichungssysteme dar. Das diskrete Verschiebungsfeld $u_h^{(0)}$ auf dem Level $\Omega_{(0)}$ ist:

$$u \approx u_h^{(0)} = \sum_{i=1}^{N^{(0)}} N_i^{(0)} d_i^{(0)} \quad , \quad (6.36)$$

mit

$$\left\{ N_i^{(0)} \right\}_{i=1}^{N_{nd}^{(0)}}$$

als in Abb. 6.8a) dargestellte lineare Interpolationsfunktionen der diskreten Knotenwerte $d_i^{(0)}$. Ist die Ordnung der Ansatzfunktionen bekannt (hier lineare Ansätze), so lassen sich diese über ihre Stützstellen und somit als Vektoren $N_i^{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)}}$ repräsentieren:

$$N_i^{(0)T} = \left[0 \cdots 0 \underset{\substack{| \\ \text{Knoten } i}}{1} 0 \cdots 0 \right], \quad i = 1, \dots, N^{(0)}, \quad N_i^{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)}}. \quad (6.37)$$

Es werden nun $N_{nd}^{(1)}$ sogenannte Aggregate

$$\left\{ \mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)} \right\}_{i^{(1)}=1}^{N^{(1)}},$$

wie in Abb. 6.8b) dargestellt, eingeführt. Ein Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$ ist dabei eine disjunkte Gruppierung von Knoten $i^{(0)}$ des Level $\Omega_{(0)}$. Aggregate überlappen einander somit nicht, sondern sind jeweils durch ein Finites Element voneinander getrennt. Die Ermittlung der Aggregate wird detaillierter in Kap. 6.4.2 behandelt. Jeder Knoten $i^{(0)}$ gehört zu genau einem Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$. Ein Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$ wird dann auf dem nächst-größeren Level $\Omega_{(1)}$ durch einen Knoten $i^{(1)}$ repräsentiert (Vanek et al. (2001)):

$$i^{(1)} \Leftrightarrow \mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}, \quad i = 1, \dots, N_{nd}^{(1)}. \quad (6.38)$$

Wichtig ist, dass mit den Aggregaten keine geometrischen Informationen verknüpft sind, diese sind ausschließlich eine Gruppierung von Indizes von $A_{(0)}$, anders als im vorliegenden Beispiel suggeriert wird.

Betrachtet man nun die in Abb. 6.8b) dargestellten Ansatzfunktionen

$$\left\{ \hat{N}_i^{(1)} \right\}_{i=1}^{N_{nd}^{(1)}}$$

für Aggregate $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$ beziehungsweise Knoten $i^{(1)}$, so lautet das diskrete Verschiebungsfeld $u_h^{(1)}$ auf $\Omega_{(1)}$:

$$u \approx u_h^{(1)} = \sum_{i=1}^{N^{(1)}} \hat{N}_i^{(1)} d_i^{(1)}. \quad (6.39)$$

Die vektorielle Repräsentation dieser Ansatzfunktionen ist konform zu Gl. (6.37):

$$\hat{N}_i^{(1)T} = \left[0 \cdots 0 \underbrace{1 \ 1 \ 1}_{\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}} 0 \cdots 0 \right], \quad i = 1, \dots, N_{nd}^{(1)}, \quad \hat{N}_i^{(1)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)}}. \quad (6.40)$$

Die Vektoren $\hat{N}_i^{(1)}$ bilden die Spalten der – vorläufigen – Prolongationsmatrix $\hat{P}_{(0)}^{(1)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)} \times N^{(1)}}$:

$$\hat{P}_{(0)}^{(1)} = \left[\hat{N}_1^{(1)} \ \hat{N}_2^{(1)} \ \cdots \ \hat{N}_{N^{(1)}}^{(1)} \right]. \quad (6.41)$$

Die dieserart konstruierte Prolongation $\hat{P}_{(0)}^{(1)}$ besitzt bereits eine fundamentale Eigenschaft: Sie ist in der Lage, alle unter Missachtung der Dirichlet-Randbedingungen möglichen Starrkörper-

bewegungen des Körpers exakt auf das nächst–größere Level abzubilden. Das Modellproblem des Dehnstabs aus Abb. 6.8a) besitzt als einzigen Starrkörpermode $\mathbf{b}_1^{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)}}$ die Translation entlang der Stabachse:

$$\mathbf{b}_1^{(0)T} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{1}^T . \quad (6.42)$$

Dieser lässt sich mit den Ansatzfunktionen $\hat{N}_i^{(1)}$ exakt darstellen, und ist somit mit Gl. (6.41) im Bildbereich von $\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}$ enthalten. Die Starrkörpermoden, die in der Multigrid–Literatur auch allgemeiner *konstante Funktionen* genannt werden, stellen diejenigen Funktionen mit der niedrigstmöglichen Energie dar. Missachtet man den Einfluss der Dirichlet–Randbedingung, so gilt für den Starrkörpermode $\mathbf{b}_1^{(0)}$ hier:

$$\mathbf{A}_{(0)}^0 \mathbf{b}_1^{(0)} = \mathbf{0} \quad , \quad \|\mathbf{b}_1^{(0)}\|_{\mathbf{A}_{(0)}^0} = 0 . \quad (6.43)$$

$\mathbf{A}_{(0)}^0$ ist hierin die semipositiv–definite Steifigkeitsmatrix des ungelagerten Dehnstabes. Da nach den Ausführungen in Kap. 6.1.1 und 6.1.2 vor allem die algebraisch glatten, niedrigenergetischen Fehleranteile durch die Groblevelkorrektur behoben werden sollen, ist es eine zwingende Minimalanforderung an die Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}$, dass *alle* Starrkörpermoden eines Systems im Bildbereich der Prolongation enthalten sind.

Definition: Der Bildbereich $\text{range}(\mathbf{P}^{m \times n})$ einer Matrix ist definiert als:
 $\text{range}(\mathbf{P}^{m \times n}) = \{ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m \mid \mathbf{y} = \mathbf{P}\mathbf{x} \text{ für } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \} .$

Was hier am Beispiel des Dehnstabs mit einem Starrkörpermode $\mathbf{b}_1^{(0)}$ gezeigt wurde, lässt sich für beliebige Körper im \mathbb{R}^3 verallgemeinern. Ein solcher Körper besitzt $rbm = 6$ linear unabhängige Starrkörpermoden $\mathbf{b}_m^{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)}}$ (3 Translationen und 3 Rotationen entlang und um orthogonale Raumachsen). Diese Moden werden in Vanek et al. (2001) zu einer mit $\Omega_{(0)}$ assoziierten Matrix $\mathbf{B}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)} \times rbm}$ zusammengefasst. $\mathbf{B}^{(0)}$ repräsentiert dann den sogenannten *Kernel* der mit dem ungelagerten Körper assoziierten Steifigkeitsmatrix $\mathbf{A}_{(0)}^0$:

$$\text{range}(\mathbf{B}^{(0)}) = \text{kernel}(\mathbf{A}_{(0)}^0) . \quad (6.44)$$

Definition: Der Kernel $\text{kernel}(\mathbf{A}^{n \times n})$ einer Matrix ist definiert als:

$$\text{kernel}(\mathbf{A}^{n \times n}) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0} \} .$$

Ist eine Matrix $\mathbf{A}^{n \times n}$ nicht singular, so gilt:

$$\text{kernel}(\mathbf{A}^{n \times n}) = \{ \mathbf{0} \} \quad \text{und} \quad rbm = \dim(\text{kernel}(\mathbf{A})) = 0 .$$

Die Minimalanforderung an die Prolongation lässt sich dann schreiben als:

$$\text{range}(\mathbf{B}^{(0)}) = \text{span} \left\{ \mathbf{b}_1^{(0)} \quad \mathbf{b}_2^{(0)} \quad \dots \quad \mathbf{b}_{rbm}^{(0)} \right\} \subset \text{range} \left(\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} \right) . \quad (6.45)$$

Für das eindimensionale Modellproblem Abb. 6.8a) ist $rbm = 1$, die einzige auftretende Starrkörperbewegung des ungelagerten Stabes ist die Translation entlang der Stabachse $\mathbf{b}_1^{(0)}$. Es ist somit hier

$$\mathbf{B}^{(0)T} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{1}^T, \quad (6.46)$$

und nach Gl. (6.45) gilt:

$$\text{range}(\mathbf{B}^{(0)}) = \text{span} \left\{ \begin{bmatrix} \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} \right\} \subset \text{range}(\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}) = \text{span} \left\{ \dots \begin{bmatrix} \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} \dots \right\}. \quad (6.47)$$

Man beachte, dass die Spaltenvektoren von $\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}$ jeweils den Starrkörpermode eines ungelagerten Aggregates $\mathcal{A}_{i(0)}^{(0)}$ darstellen. Gl. (6.45) kann somit aggregatweise erfüllt werden.

Bis jetzt wurde erreicht, dass die konstanten Fehleranteile im Bildbereich $\text{range}(\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)})$ der Prolongation enthalten sind und daher auf dem Groblevel abgebildet werden können. Zur Konstruktion einer guten Groblevelkorrektur ist dies allein jedoch nicht ausreichend, da auch langwellige Fehleranteile mit einem gewissen Gradienten nach Kap. 6.1.1, Gl. (6.10)₂ niedrig-energetisch sind und von der Groblevelkorrektur erfasst werden sollen und nicht nur die Starrkörpermoden. Die bisher eingeführte abschnittsweise konstante Interpolation in Abb. 6.8b) ist hierfür jedoch nicht geeignet (Stüben (2001)). Nimmt man für das Modellproblem $EA/h = 1$, die Belastung zu $P = 1$ sowie eine Startschätzung $\mathbf{d}^0 = \mathbf{0}$ an, so ergibt sich der in Abb. 6.9a) dargestellte linear verlaufende, geometrisch glatte und niedrig-energetische Fehler $\mathbf{e}^{(0)}$. Führt man für diesen Fehler eine Grobgitterkorrektur

$$\mathbf{e}^{(0)} \leftarrow \mathbf{e}^{(0)} - \hat{\mathbf{z}}^{(0)} \quad (6.48)$$

durch, mit

$$\hat{\mathbf{z}}^{(0)} = \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} \left(\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)T} \mathbf{A}_{(0)} \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} \right)^{-1} \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)T} \mathbf{A}_{(0)} \mathbf{e}_{(0)}, \quad (6.49)$$

so stellt man fest, dass der Gradient von $\hat{\mathbf{z}}^{(0)}$ zwischen den Aggregaten dem Gradienten des ursprünglichen Fehlers wie gewünscht entspricht, aufgrund der konstanten Ansätze innerhalb der Aggregate die Korrektur betragsmäßig jedoch weit hinter dem ursprünglichen Fehler zurück-

bleibt und dadurch ein erheblicher Fehleranteil $e^{(0)} - \hat{z}^{(0)}$ nach der Korrektur im System verbleibt (Abb. 6.9a).

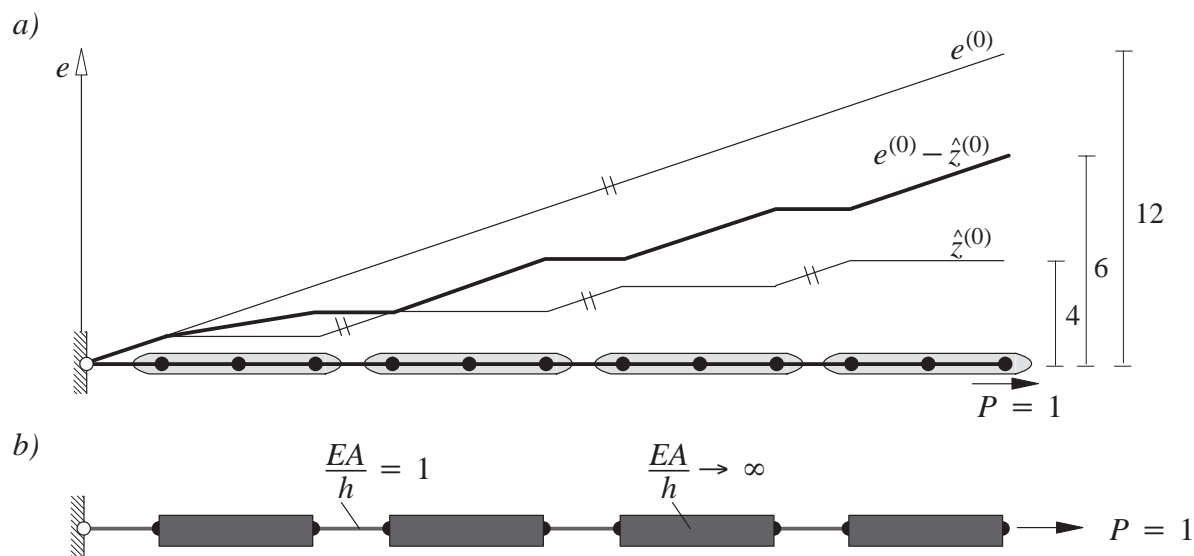


Abb. 6.9: unzureichende Approximation linearer Fehlerverläufe durch abschnittsweise konstante Ansatzfunktionen auf dem Groblevel

Die 'Knicke' im Verlauf von $e^{(0)} - \hat{z}^{(0)}$ können effizient durch eine Nachglättung auf dem feinen Level entfernt werden, der niedrig-energetische glatte Anteil bleibt jedoch erhalten. Bei einer Vergrößerung von $\Omega_{(0)}$ zu $\Omega_{(1)}$ um den Faktor Drei (drei Knoten bilden ein Aggregat) entspricht die Korrektur nur einem Drittel des vorhandenen Fehlers, die 'durchschnittliche Steigung' von $\hat{z}^{(0)}$ ist um diesen Faktor Drei zu gering. Entsprechend besser (respektive schlechter) fällt die Korrektur bei kleineren (respektive größeren) Aggregaten aus.

Für dieses Phänomen kann eine noch anschaulichere Deutung gegeben werden. Betrachtet man das Groblevelsystem $\Omega_{(1)}$ wie in Abb. 6.9b dargestellt als Stab, der im Bereich der Aggregate eine unendliche Dehnsteifigkeit besitzt (d.h. die Verschiebung innerhalb des Aggregates muss konstant verlaufen), und belastet diesen mit der gleichen Belastung $P = 1$ wie das ursprüngliche System $\Omega_{(0)}$, so stellt sich als Lösung ein Verschiebungsverlauf ein, der der Groblevelkorrektur $\hat{z}^{(0)}$ entspricht. Das Groblevelproblem

$$\left(\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)T} \mathbf{A}_{(0)} \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} \right) \hat{\mathbf{z}}^{(1)} = \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)T} \mathbf{A}_{(0)} \mathbf{e}_{(0)} \quad (6.50)$$

ist somit aufgrund der dehnstarrten Anteile um genau den Faktor Drei zu steif.

Braess (1995) schlägt hierfür eine einfache Skalierung der Steifigkeiten des Groblevelproblems vor:

$$\frac{1}{\beta} \hat{\mathbf{A}}_{(1)} \hat{\mathbf{z}}^{(1)} = \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)T} \mathbf{A}_{(0)} \mathbf{e}_{(0)}, \quad (6.51)$$

mit $\beta = 3$ für das Modellproblem. Bei strukturierten Diskretisierungen konstanter Netzdichte und ebenfalls strukturierten Aggregaten konstanter Größe kann mit dieser Skalierung eine optimale Korrektur erreicht werden. Im allgemeineren Fall beliebiger unstrukturierter Diskretisierung mit stark unterschiedlicher Netzdichte ergeben sich keine strukturierten Aggregate konstanter Größe und die Wahl eines idealen Faktors β ist nur schwer möglich (Stüben (2001)). Es wird daher der Ansatz von Vanek et al. (1996) verfolgt, der eine Glättung der abschnittsweise konstanten Grobitteransätze mittels einer gedämpften Jacobi–Glättung vorsieht:

$$\mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)} = (\mathbf{I}_{(l-1)} - \omega \mathbf{M}_{J(l-1)}^{-1} \mathbf{A}_{(l-1)}) \hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}, \quad l = 1, \dots, L. \quad (6.52)$$

Angewandt auf das Modellproblem ergeben sich mit $\omega = 2/3$ und $\mathbf{M}_{J(0)} = \text{diag}(\mathbf{A}_{(0)})$ die in Abb. 6.8c) dargestellten Ansatzfunktionen

$$\left\{ N_i^{(1)} \right\}_{i=1}^{N_{nd}^{(1)}}.$$

Die zugehörige endgültige Prolongation lautet dann:

$$\mathbf{P}_{(0)}^{(1)} = \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} (i-1)^{(1)} & i^{(1)} & (i+1)^{(1)} \\ \hline 2/3 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 2/3 & 1/3 & 0 \\ \hline 1/3 & 2/3 & 0 \\ \dots & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \hline 0 & 2/3 & 1/3 \\ \hline 0 & 1/3 & 2/3 \\ 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 2/3 \\ \hline 0 & 0 & 1/3 \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{array} & \left. \begin{array}{l} \mathcal{A}_{i-1}^{(0)} \\ \mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)} \\ \mathcal{A}_{i+1}^{(0)} \end{array} \right\} \end{array}. \quad (6.53)$$

Wiederholt man mit der derart geglätteten Prolongation, die neben konstanten Funktionen (Feinlevelvektoren) nun auch lineare Funktionen exakt abbilden kann, die Groblevelkorrektur aus Abb. 6.9a), so ergibt sich die in Abb. 6.10 dargestellte, bis auf die Randstörungen optimale Korrektur $\mathbf{z}^{(0)}$. Der Dämpfungsparameter ω in Gl. (6.52) bestimmt die Gestalt der Ansatzfunktionen und liefert mit $\omega = 2/3$ die für das Modellproblem optimalen Ansätze $N_i^{(1)}$ in Abb. 6.8c). Im allgemeinen Fall ist die Wahl von ω nicht einfach, eine von Mandel et al. (1999) angegebene Heuristik zur Wahl des Dämpfungsparameters ist:

$$\omega = \frac{3}{2\bar{\lambda}}, \quad \bar{\lambda} \approx \lambda_{\max}(\mathbf{M}_J^{-1} \mathbf{A}). \quad (6.54)$$

Für eine Anzahl an Grobleveln $L > 1$ muss das bis hier gezeigte Vorgehen erweitert werden. Es wird nun ein weiteres Groblevel $\Omega_{(l)}$, $l = 2$ hinzugefügt, um die Formulierung im Falle mehrerer Groblevel zu zeigen.

Hierzu werden Aggregate

$$\left\{ \mathcal{A}_{i^{(l)}}^{(l-1)} \right\}_{i^{(l)}=1}^{N^{(l)}}$$

wie in Abb. 6.8d) dargestellt, gebildet, und eine sogenannte zusammengesetzte vorläufige Prolongation

$$\tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)} = \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} \hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(2)} \dots \hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}, \quad \tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)} \times N^{(l)}} \quad (6.55)$$

wird eingeführt. Dieser stellt eine Abbildung von jedem Groblevel $\Omega_{(l)}$, $l > 1$ auf das feine Level $\Omega_{(0)}$ dar. Für $\tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)}$ wird analog zu Gl. (6.45) gefordert, dass die Starrkörpermoden (konstante Funktionen) exakt abgebildet werden können:

$$\text{range}(\mathbf{B}^{(0)}) \subset \text{range}(\tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)}). \quad (6.56)$$

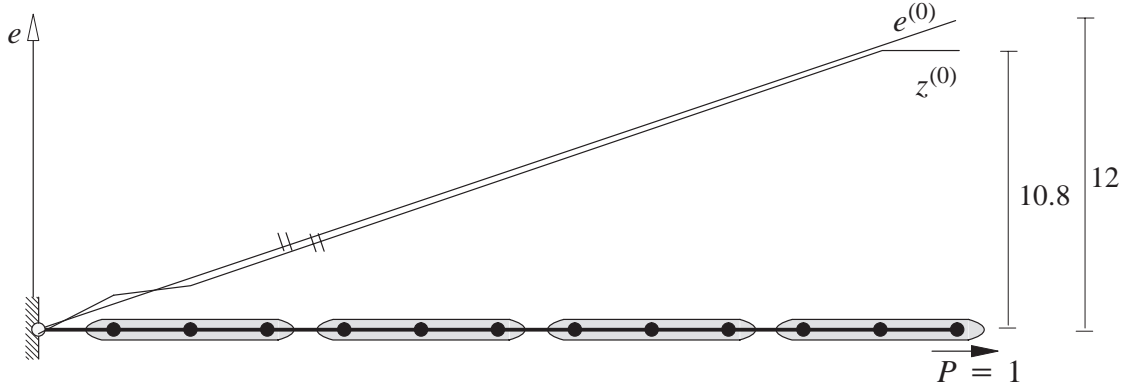


Abb. 6.10: Approximation linearer Fehlerverläufe durch geglättete Groblevelansatzfunktionen

Die zusammengesetzte Prolongation $\tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)}$ braucht jedoch nicht explizit ermittelt werden. Vielmehr werden Prolongationen $\hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}$ und Matrizen $\mathbf{B}^{(l)}$ konstruiert, so dass gilt:

$$\mathbf{B}^{(l-1)} = \hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)} \mathbf{B}^{(l)}, \quad l = 1, \dots, L. \quad (6.57)$$

Ist Gl. (6.57) für alle Level erfüllt, so gilt auch Gl. (6.56), was sich durch Einsetzen der Rekursion Gl. (6.57) in (6.56) zeigen lässt. Bezeichnet man nun mit $n_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ die Anzahl der Freiheitsgrade, die mit einem Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ assoziiert sind, und nimmt nur aus Gründen der einfacheren Darstellung an, dass die Numerierung der Freiheitsgrade innerhalb der Aggregate kontinuierlich ist, so lässt sich $\mathbf{B}^{(l-1)}$ in $N_{nd}^{(l)}$ aggregatweise Blöcke $\mathbf{B}_{i^{(l)}}^{(l-1)} \in \mathbb{R}^{n_{i^{(l)}}^{(l-1)} \times rbm}$ zerlegen:

$$\mathbf{B}^{(l-1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1^{(l-1)} \\ \mathbf{B}_2^{(l-1)} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{N_{nd}^{(l)}}^{(l-1)} \end{bmatrix}. \quad (6.58)$$

Jeder Block $\mathbf{B}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ ist mit einem Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ assoziiert. Mittels einer modifizierten Gram–Schmidt–Orthogonalisierung (auf die näher in Kap. 6.4.3 eingegangen wird) wird eine Basis $\mathbf{Q}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ der Blöcke $\mathbf{B}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ erstellt:

$$\mathbf{B}_{i^{(l)}}^{(l-1)} = \mathbf{Q}_{i^{(l)}}^{(l-1)} \mathbf{U}_{i^{(l)}}^{(l-1)} \quad , \quad \mathbf{B}_{i^{(l)}}^{(l-1)}, \mathbf{Q}_{i^{(l)}}^{(l-1)} \in \mathbb{R}^{n_{i^{(l)}}^{(l-1)} \times rbm} \quad , \quad \mathbf{U}_{i^{(l)}}^{(l-1)} \in \mathbb{R}^{rbm \times rbm} \quad . \quad (6.59)$$

Die rbm Spaltenvektoren von $\mathbf{Q}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ sind eine orthonormierte Basis der Spaltenvektoren von $\mathbf{B}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$, und $\mathbf{U}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ ist eine quadratische obere Dreiecksmatrix. Die vorläufige Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}$ und Matrix $\mathbf{B}^{(l)}$ ergeben sich dann aus $\mathbf{Q}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ und $\mathbf{U}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ mit

$$\hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)} = \text{blockdiag} \left(\mathbf{Q}_{i^{(l)}}^{(l-1)} \right)_{i^{(l)}=1, \dots, N_{nd}^{(l)}} \quad (6.60)$$

als dünnbesetzte Matrix mit Hauptdiagonalblöcken $\mathbf{Q}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ und

$$\mathbf{B}^{(l)} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^{(l-1)} \\ \mathbf{U}_2^{(l-1)} \\ \vdots \\ \mathbf{U}_{N_{nd}^{(l)}}^{(l-1)} \end{bmatrix} \quad . \quad (6.61)$$

Gl. (6.57) in ausgeschriebener Form ist somit:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B}_1^{(l-1)} \\ \mathbf{B}_2^{(l-1)} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{N_{nd}^{(l)}}^{(l-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^{(l-1)} & & & \\ & \mathbf{Q}_2^{(l-1)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{Q}_{N_{nd}^{(l)}}^{(l-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^{(l-1)} \\ \mathbf{U}_2^{(l-1)} \\ \vdots \\ \mathbf{U}_{N_{nd}^{(l)}}^{(l-1)} \end{bmatrix} \quad . \quad (6.62)$$

Die dieserart konstruierten vorläufigen Prolongationen $\hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}$ und Matrizen $\mathbf{B}^{(l)}$ erfüllen demnach Gl. (6.57) und somit auch Gl. (6.56). Die Schritte Gl. (6.58) – (6.61) können dann für das nächst–größere Level $l \leftarrow l + 1$ wiederholt werden. Die endgültigen Prolongationen $\mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)}$ ergeben sich wiederum durch die Glättung Gl. (6.52).

Veranschaulicht wird dieses Prozedere anhand des Modellproblems. Nach Gl. (6.46) war $\mathbf{B}^{(0)} = \mathbf{1}$, und die Zerlegung in $N_{nd}^{(1)} = 4$ aggregatweise Blöcke $\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{3 \times 1}$ nach Gl. (6.58) ist:

$$\mathbf{B}^{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1^{(0)} \\ \mathbf{B}_2^{(0)} \\ \mathbf{B}_3^{(0)} \\ \mathbf{B}_4^{(0)} \end{bmatrix} = \begin{array}{c|c} \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} & \begin{array}{c} \mathcal{A}_1^{(0)} \\ \mathcal{A}_2^{(0)} \\ \mathcal{A}_3^{(0)} \\ \mathcal{A}_4^{(0)} \end{array} \end{array} . \quad (6.63)$$

Die modifizierte Gram–Schmidt–Orthogonalisierung Gl. (6.59) der Blöcke $\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)}$ ist in diesem Falle mit $rbm = 1$ trivial und ergibt:

$$\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)} = \mathbf{Q}_{i^{(1)}}^{(0)} \mathbf{U}_{i^{(1)}}^{(0)} = \begin{bmatrix} \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{3} \end{bmatrix} , \quad i^{(1)} = 1, \dots, 4 . \quad (6.64)$$

Die vorläufige Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}$ und Matrix $\mathbf{B}^{(1)}$ lauten dann nach Gl. (6.60) und (6.61):

$$\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^{(0)} & & & \\ & \mathbf{Q}_2^{(0)} & & \\ & & \mathbf{Q}_3^{(0)} & \\ & & & \mathbf{Q}_4^{(0)} \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \\ \sqrt{1/3} \end{array} \end{array} , \quad \mathbf{B}^{(1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^{(0)} \\ \mathbf{U}_2^{(0)} \\ \mathbf{U}_3^{(0)} \\ \mathbf{U}_4^{(0)} \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \sqrt{3} \\ \sqrt{3} \\ \sqrt{3} \\ \sqrt{3} \end{array} \end{array} . \quad (6.65)$$

Die endgültige Prolongation $\mathbf{P}_{(0)}^{(1)}$ ergibt sich durch die Glättung Gl. (6.52).

Mit den in Abb. 6.8d dargestellten $N_{nd}^{(2)}$ Aggregaten $\mathcal{A}_{i^{(2)}}^{(1)}$ werden nun die Schritte Gl. (6.58) bis (6.61) für $\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(2)}$ und $\mathbf{B}^{(2)}$ wiederholt. Die aggregatweise Aufteilung von $\mathbf{B}^{(1)}$ aus Gl. (6.65) ist

$$\mathbf{B}^{(1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1^{(1)} \\ \mathbf{B}_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} \\ \sqrt{3} \\ \sqrt{3} \\ \sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{array}{c} \mathcal{A}_1^{(1)} \\ \mathcal{A}_2^{(1)} \end{array}, \quad (6.66)$$

die Gram–Schmidt–Orthogonalisierung der Blöcke $\mathbf{B}_{i^{(2)}}^{(1)}$ liefert

$$\mathbf{B}_{i^{(2)}}^{(1)} = \mathbf{Q}_{i^{(2)}}^{(1)} \mathbf{U}_{i^{(2)}}^{(1)} = \begin{bmatrix} \sqrt{1/2} \\ \sqrt{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{6} \end{bmatrix}, \quad i^{(2)} = 1, 2, \quad (6.67)$$

und die vorläufige Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(2)}$ und Matrix $\mathbf{B}^{(2)}$ sind dann:

$$\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(2)} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^{(1)} \\ \mathbf{Q}_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{1/2} \\ \sqrt{1/2} \\ \sqrt{1/2} \\ \sqrt{1/2} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B}^{(2)} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^{(1)} \\ \mathbf{U}_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{6} \\ \sqrt{6} \end{bmatrix}. \quad (6.68)$$

Die endgültige Prolongation $\mathbf{P}_{(1)}^{(2)}$ ergibt sich wiederum aus $\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(2)}$ durch Glättung Gl. (6.52).

Der Vorgang könnte durch erneute Aggregation der Aggregate $\mathcal{A}_{i^{(2)}}^{(1)}$ noch ein weiteres Mal zur Generierung eines Levels $\Omega_{(3)}$ wiederholt werden, was hier jedoch nicht mehr explizit gezeigt wird.

Mit den Prolongationen $\mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)}$, $l = 1, \dots, 2$ und den Restriktionen als deren Transponierte liegen alle Bestandteile einer 3–Level–Multigrid–Vorkonditionierung nach Kap. 6.2.3 nun vor.

Nachdem im folgenden Kapitel detailliert auf die bisher nicht behandelte Bildung der Aggregate eingegangen wird, folgt in Kap. 6.4.3 die Anwendung des Smoothed–Aggregation–Multigrid auf die 7–Parameter–Schalenformulierung. Dort wird auch auf die bisher vernachlässigte Betrachtung physikalischer Dirichlet–Randbedingungen sowie auf die Parallelisierung der Multigrid–Vorkonditionierung eingegangen.

6.4.2 Parallele Bildung der Aggregate

Da auf den größeren Leveln $\Omega_{(l)}$, $l > 0$ keine Diskretisierung als Träger geometrischer Informationen vorliegt, müssen die benötigten Aggregate anhand der Belegungsstruktur $S(\mathbf{A}_{(l)})$, $l = 0, \dots, L$ von $\mathbf{A}_{(l)}$ ermittelt werden.

Resultiert $\mathbf{A}_{(0)}$ aus einer Diskretisierung mit Schalenelementen, so ist

$$\mathbf{A}_{(0)} \in \mathbb{R}^{N_{nd}^{(0)} \times N_{nd}^{(0)}} \quad (6.69)$$

eine dünnbesetzte Blockmatrix aus Knotenblöcken

$$\mathbf{A}_{ij} \in \mathbb{R}^{N_i^{dof} \times N_j^{dof}}, \quad i, j = 1, \dots, N_{nd}^{(0)}, \quad (6.70)$$

wobei $N^{dof} \leq 6$ die Anzahl der Freiheitsgrade (3 Mittelflächenverschiebungen und 3 Differenzverschiebungen) eines Knotens darstellt. Die Dimension der Knotenblöcke kann aufgrund vorab eliminierter Gleichungen physikalischer Dirichlet–Randbedingungen auch kleiner als $N^{dof} = 6$ sein. Hauptdiagonalblöcke sind dann quadratische ($N_i^{dof} \times N_i^{dof}$), Nebendiagonalblöcke rechteckige ($N_i^{dof} \times N_j^{dof}$, $i \neq j$) Teilmatrizen. Bei der Bildung der Aggregate sollen jeweils alle Unbekannten eines Knotens demselben Aggregat zugewiesen werden. Es genügt daher, die Blockstruktur der Koeffizientenmatrix mit Blockindizes $i, j = 1, \dots, N_{nd}^{(l)}$ zu betrachten.

In dieser Arbeit erfolgt eine Beschränkung auf vierknotige bilineare Schalenelemente. Das Vorgehen ist für dreiknotige Elemente identisch, Elemente mit höheren Interpolationsansätzen und Mittelknoten bedürfen gesonderter Überlegungen, auf die hier nicht eingegangen wird.

Ziel ist es, anhand der Blockmatrix disjunkte Aggregate $\mathcal{A}_{i^{(l+1)}}^{(l)}$ aus Knotenindizes $i^{(l)}$ zu bilden, die dann auf dem nächstgrößeren Level durch einen Knoten $i^{(l+1)}$ repräsentiert werden. Dabei sind folgende Grundsätze zu beachten:

- Jeder Knoten $i^{(l)}$ muss zu genau einem Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(l+1)}}^{(l)}$ gehören.
- Ein Aggregat soll möglichst einen Durchmesser von drei Knoten in jeder räumlichen Dimension aufweisen, im Falle der Schalendiskretisierung also neun Knoten umfassen (Vanek et al. (2001)).
- Alle Aggregate sollen möglichst gleich viele Knoten enthalten und geometrisch interpretiert eine gedrungene Gestalt aufweisen.

Für strukturierte Diskretisierungen sind solche optimalen Aggregate schematisch in Abb. 6.11 dargestellt.

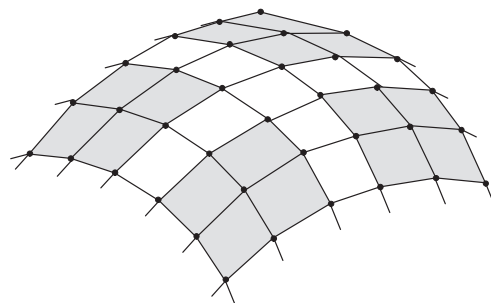


Abb. 6.11: Aggregate optimaler Gestalt und Größe

Bei unstrukturierten Netzen können solche optimalen Aggregate nur näherungsweise erreicht werden, ein solcher Fall ist in Abb. 6.12 für eine unstrukturierte Diskretisierung einer Halbkugel beispielhaft gegeben.

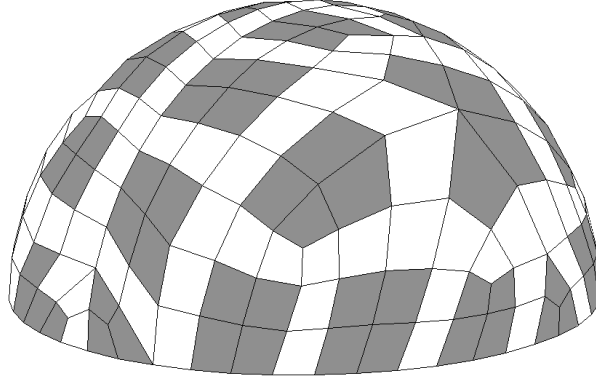


Abb. 6.12: Aggregate bei unstrukturierter Diskretisierung einer Halbkugel

Der verwendete parallele Aggregationsalgorithmus folgt im wesentlichen der in Tuminaro und Tong (2000) beschriebenen 'entkoppelten Aggregation'. Hierbei werden die Knotenindizes $i^{(l)}, i = 1, \dots, N_{nd}^{(l)}$ des feinsten Levels gemäß der vorliegenden Gebietszerlegung von $\Omega_{(0)}$ in Teilgebiete $\Omega_k^{(l)}, k = 1, \dots, N^P$ auf die Prozesse verteilt. Die Anzahl der Teilgebiete stimmt dabei mit der Anzahl der Prozesse überein und sei auf jedem Level gleich:

$$N_{(l)}^P = N^P = \text{konstant}, \quad l = 0, \dots, L. \quad (6.71)$$

Es ergibt sich für jeden Prozess k eine Liste $H_{\Omega_k}^{(l)}$ der Knotenindizes seines Teilgebietes $\Omega_k^{(l)}$:

$$H_{\Omega_k}^{(l)} = \left\{ i^{(l)} \in \Omega_k^{(l)} \right\}, \quad k = 1, \dots, N^P, \quad l = 0, \dots, L. \quad (6.72)$$

Man beachte, dass Knotenindizes $i^{(l)} \in H_{\Omega_k}^{(l)}$ Blockzeilen- und -Spaltenindizes von $\mathbf{A}_{(l)}^{\Omega_k}$ darstellen. Zusätzlich benötigt man noch die Definition der direkten Nachbarschaft $\mathcal{P}(i^{(l)})$ eines Knotens $i^{(l)}$:

$$\mathcal{P}(i^{(l)}) = \left\{ j^{(l)} : \|\mathbf{A}_{ij}\| \neq 0 \right\} \cup \left\{ i^{(l)} \right\}, \quad i^{(l)}, j^{(l)} \in H_{\Omega_k}^{(l)} \quad (6.73)$$

Diese Nachbarschaft um $i^{(l)}$ beinhaltet alle Knoten $j^{(l)}$, die mit $i^{(l)}$ einen von Null verschiedenen Nebendiagonalelement \mathbf{A}_{ij} teilen, einschließlich des Knotens $i^{(l)}$ selbst. Geometrisch betrachtet sind dies alle Knoten $j^{(l)}$, die über ein gemeinsames Finites Element mit Knoten $i^{(l)}$ verbunden sind. Der Aggregationsalgorithmus ist in Abb. 6.13 angegeben.

Die Teilgebietsaufteilung des feinsten Levels wird vom Algorithmus respektiert, das heißt auf allen größeren Levels liegt die gleiche Gebietszerlegung vor wie auf dem feinsten Level. Dies ist zwar nachteilig für die Konvergenz, führt jedoch zu einem deutlich reduzierten Kommunikationsaufwand bei der Prolongation, Restriktion und der Bildung der Grobgitterkoeffizientenmatrizen. Für das größte Level ist dieser Umstand nicht von Bedeutung, da dort keine Vorkonditionierung, sondern eine direkte parallele Lösung vorgenommen wird.

Der Aggregationsalgorithmus verwendet neben der Einteilung in Knotenblöcke keinerlei weitere Diskretisierungsinformation und ist daher auf jedem Level anwendbar. Auf den Grobleveln $\Omega_{(l)}$, $l > 0$ wird derselbe Algorithmus zur Aggregation der 'Knoten' wiederholt, die bereits Aggregate repräsentieren.

Gegeben :

Prozess k , Level l ,

Teilgebetsmatrix $A_{(l)}^{\Omega_{kk}}$, $H_{\Omega_k}^{(l)} = \{ i^{(l)} \in \Omega_k^{(l)} \}$,

Knoten $\hat{i}^{(l)} = -1$, $i^{(l+1)} = 1$

Aggregation :

1) **Wenn** $\hat{i}^{(l)} = -1$ **wähle** $\hat{i}^{(l)} \in H_{\Omega_k}^{(l)}$

2) $\mathcal{A}_{i^{(l+1)}}^{(l)} = \mathcal{P}(\hat{i}^{(l)}) \in H_{\Omega_k}^{(l)}$

3) $H_{\Omega_k}^{(l)} \leftarrow H_{\Omega_k}^{(l)} \setminus \mathcal{A}_{i^{(l+1)}}^{(l)}$

4) **Wenn** $H_{\Omega_k}^{(l)} = \{0\}$ **Ende**

5) **Wenn möglich wähle**

$$\hat{i}^{(l)} \in H_{\Omega_k}^{(l)} : \begin{cases} \hat{i}^{(l)} \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\mathcal{A}_{i^{(l+1)}}^{(l)})) \\ \hat{i}^{(l)} \notin \mathcal{P}(\mathcal{A}_{i^{(l+1)}}^{(l)}) \end{cases}$$

sonst $\hat{i}^{(l)} = -1$

$i^{(l+1)} \leftarrow i^{(l+1)} + 1$

6) **Gehe zu** 1)

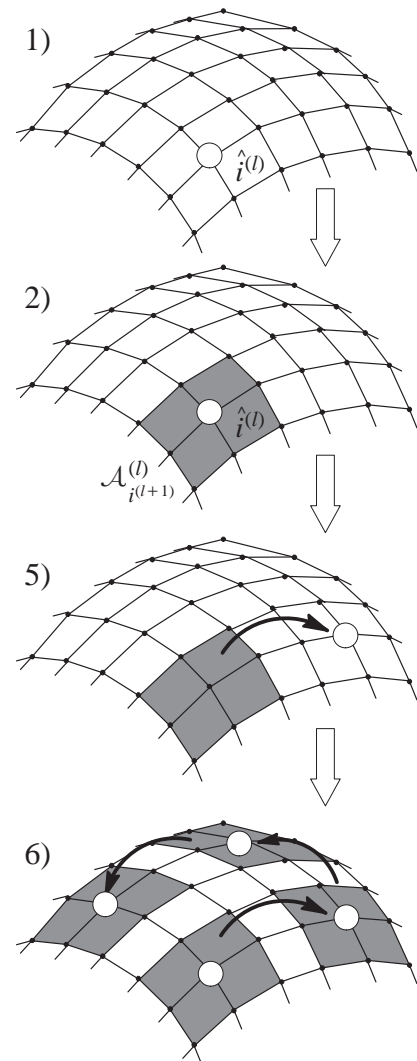


Abb. 6.13: parallele Aggregation und geometrische Veranschaulichung

Tuminaro und Tong (2000) beschreiben neben dieser entkoppelten Aggregation zwei weitere parallele Aggregationsstrategien, bei denen teilgebietsübergreifend Aggregate gebildet werden. Dabei wird auf jedem Level eine eigene Gebietszerlegung vorgenommen, die jedoch nicht mit derjenigen des feinsten Levels übereinstimmen muss. Die Kommunikationsmenge und der parallele Organisationsaufwand liegt bei diesem Vorgehen jedoch deutlich höher, so dass eine deutliche Verbesserung des Konvergenzfaktors erzielt werden muss, um diesen zusätzlichen numerischen Aufwand zu amortisieren.

6.4.3 Smoothed–Aggregation–Multigrid für die 7–Parameter–Schalenformulierung

Um das in Kap. 6.4.1 anhand eines Modellproblems eingeführte Vorgehen der Bildung von Restriktions– und Prolongationsmatrizen auf die 7–Parameter–Schalenformulierung anzuwenden, müssen nur einige wenige Ergänzungen vorgenommen werden.

Wesentliche Neuerung ist jetzt die knotenblockweise Betrachtung der Matrizen aufgrund der bis zu sechs Freiheitsgrade N_i^{dof} eines Schalenknotens, die Definition des Bildbereiches $\text{range}(\mathbf{B}^{(0)})$ (Gl. (6.45)) der exakt auf den Grobleveln abzubildenden Funktionen im \mathbb{R}^3 , sowie die Behandlung der physikalischen Dirichlet–Randbedingungen.

In Kap. 6.4.1 wurde die Matrix $\mathbf{B}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N^{(0)} \times rbm}$ eingeführt. Diese dient der Spezifikation der Starrkörpermoden auf $\Omega_{(0)}$, die auf den gröberen Leveln exakt abgebildet werden sollen:

$$\text{range}(\mathbf{B}^{(0)}) = \text{span} \left\{ \mathbf{b}_1^{(0)} \quad \mathbf{b}_2^{(0)} \quad \dots \quad \mathbf{b}_{rbm}^{(0)} \right\} \subset \text{range}(\tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)}), \quad l = 1, \dots, L \quad (6.74)$$

mit Gl. (6.55) als:

$$\tilde{\mathbf{P}}_{(0)}^{(l)} = \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} \hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(2)} \dots \hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}, \quad l = 1, \dots, L. \quad (6.75)$$

Gl. (6.74) wird erfüllt durch simultane Konstruktion von vorläufigen Prolongationen $\hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}$ und Matrizen $\mathbf{B}^{(l)}$, so dass nach Gl. (6.57) gilt:

$$\mathbf{B}^{(l-1)} = \hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)} \mathbf{B}^{(l)}, \quad l = 1, \dots, L. \quad (6.76)$$

Zunächst wird die Ermittlung von $\mathbf{B}^{(0)}$ und $\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}$ für die 7–Parameter–Schalenformulierung gezeigt, bevor die Verallgemeinerung für Matrizen $\mathbf{B}^{(l)}$ und Prolongationen $\hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}$ der Groblevel behandelt wird.

Im \mathbb{R}^3 gibt es nun $rbm = 6$ Starrkörpermoden b_m . Die Spaltenvektoren $\mathbf{b}_m^{(0)}$ von $\mathbf{B}^{(0)}$ bilden eine diskrete Basis für diese Moden. Diese sind drei orthogonale Translationen sowie drei Rotationen um orthogonale, raumfeste Achsen in einem beliebigen Bezugspunkt $\hat{\mathbf{x}}$.

$\mathbf{B}^{(0)}$ wird partitioniert in $N_{nd}^{(0)}$ Knotenblockmatrizen $\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_i^{dof} \times rbm}$ mit N_i^{dof} als Anzahl der Unbekannten eines Knotens $i^{(0)}$:

$$\mathbf{B}^{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1^{(0)} \\ \mathbf{B}_2^{(0)} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{N_{nd}^{(0)}}^{(0)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_i^{dof} \times rbm}, \quad i^{(0)} = 1, \dots, N_{nd}^{(0)}. \quad (6.77)$$

Die Zeilen eines einzelnen Knotenblocks $\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)}$ entsprechen den Unbekannten

$$\mathbf{d}^{iT} = [\mathbf{v}^i \quad \mathbf{w}^i]^T = [v_1^i \quad v_2^i \quad v_3^i \quad w_1^i \quad w_2^i \quad w_3^i]^T \quad (6.78)$$

des Knotens $i^{(0)}$ und die Spalten den einzelnen Starrkörpermoden.

Diese Spalten des Knotenblocks $\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)}$ sind Knotenverschiebungen \mathbf{b}_m^i , die aus einer infinitesimalen Einheitsverschiebung beziehungsweise infinitesimal kleinen Einheitsrotation als Starrkörpermode b_m für den Knoten aufgebracht werden. Mit $\hat{\mathbf{x}}^T = [\hat{x}_1^0 \hat{x}_2^0 \hat{x}_3^0]$ als beliebigen Bezugspunkt und $\mathbf{x}^{iT} = [x_1^i x_2^i x_3^i]$ als Koordinaten des Knotens $i^{(0)}$ auf der Schalenmittelfläche sowie $\mathbf{a}_3^T = [a_3^1 a_3^2 a_3^3]$ als dessen Direktor der Länge $t/2$ ergibt sich der zu Knoten $i^{(0)}$ gehörige Knotenblock $\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)}$ zu:

$$\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & x_3^i - \hat{x}_3 & -x_2^i + \hat{x}_2 \\ 0 & 1 & 0 & -x_3^i + \hat{x}_3 & 0 & x_1^i - \hat{x}_1 \\ 0 & 0 & 1 & x_2^i - \hat{x}_2 & -x_1^i + \hat{x}_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_3^3 & -a_3^2 \\ 0 & 0 & 0 & -a_3^3 & 0 & a_3^1 \\ 0 & 0 & 0 & a_3^2 & -a_3^1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.79)$$

Die Herleitung dieser diskreten Repräsentation der Moden ist exemplarisch für den Mode b_1 (Translation entlang der \mathbf{i}_1 -Achse, erste Spalte in Gl. (6.79)) und b_6 (Rotation um die \mathbf{i}_3 -Achse, letzte Spalte in Gl. (6.79)) in Abb. 6.14 veranschaulicht.

a) b_1 : Translation in x_1 -Richtung

b) b_6 : Rotation um x_3 -Achse

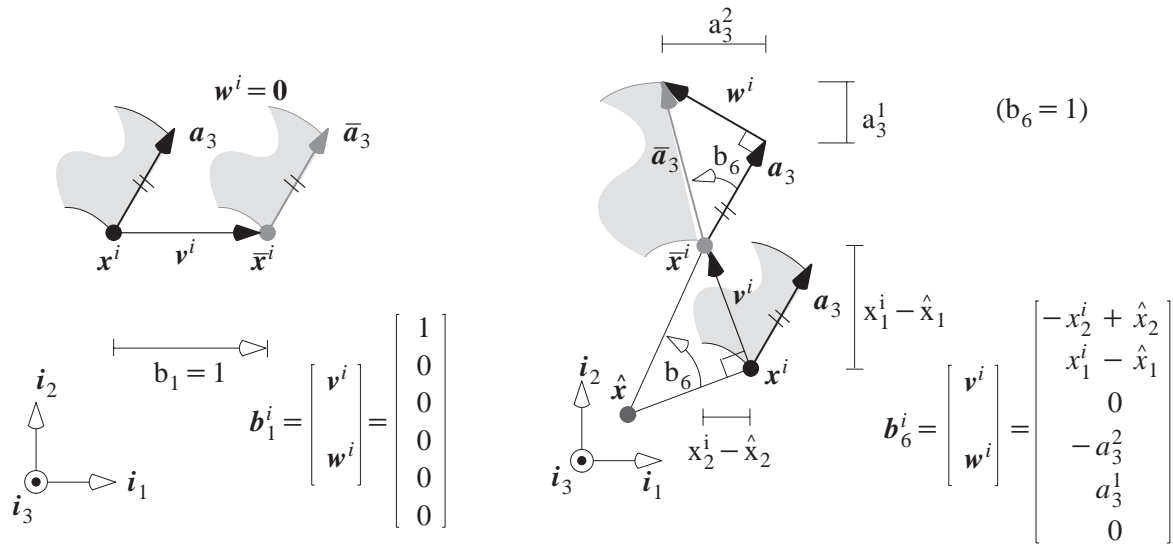


Abb. 6.14: Ermittlung der Starrkörpermoden für die 7-Parameter-Schalenformulierung

Die Knotenblöcke $\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_i^{def} \times rbm}$ werden entsprechend der gebildeten Aggregate $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$, $i^{(1)} = 1, \dots, N_{nd}^{(1)}$ zusammengefasst zu $N_{nd}^{(1)}$ Blockmatrizen $\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)}$:

$$\mathbf{B}^{(0)} = \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{B}_{1^{(1)}}^{(0)} & \mathcal{A}_1^{(0)} \\ \hline \mathbf{B}_{2^{(1)}}^{(0)} & \mathcal{A}_2^{(0)} \\ \hline \mathbf{B}_{3^{(1)}}^{(0)} & \mathcal{A}_3^{(0)} \\ \hline \vdots & \vdots \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{B}_{1^{(0)}}^{(0)} \\ \mathbf{B}_{2^{(0)}}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{9^{(0)}}^{(0)} \\ \vdots \end{array} \right\}, \quad \mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{n_{i^{(1)}}^{(0)} \times rbm} \quad (6.80)$$

Hierin ist die Dimension $n_{i^{(1)}}^{(0)}$ die Anzahl der Freiheitsgrade auf dem Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$. In Gl. (6.80) sind beispielhaft 9 Knoten $i^{(0)}$ zu einem Aggregat zusammengefasst, was jedoch nicht zwingend der Fall sein muss.

Es wird nun nach Gl. (6.59) eine orthogonale Basis $\mathbf{Q}_{i^{(1)}}^{(0)}$ der Starrkörpermoden $\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)}$ jedes Aggregats $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$ mittels einer modifizierten Gram–Schmidt–Orthogonalisierung (Abb. 6.17) bestimmt:

$$\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)} = \mathbf{Q}_{i^{(1)}}^{(0)} \mathbf{U}_{i^{(1)}}^{(0)}, \quad \mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)}, \mathbf{Q}_{i^{(1)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{n_{i^{(1)}}^{(0)} \times rbm}, \quad \mathbf{U}_{i^{(1)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{rbm \times rbm} \quad (6.81)$$

Die Bildbereiche von $\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)}$ und $\mathbf{Q}_{i^{(1)}}^{(0)}$ sind identisch und für die nach Gl. (6.60) aus den Blockmatrizen $\mathbf{Q}_{i^{(1)}}^{(0)}$ zusammengesetzte vorläufige Prolongation

$$\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} = \text{blockdiag} \left(\mathbf{Q}_{i^{(1)}}^{(0)} \right)_{i^{(1)}=1, \dots, N_{nd}^{(1)}} \quad (6.82)$$

gilt mit

$$\mathbf{Q}^{(0)} = \left[\begin{array}{c} \mathbf{Q}_{1^{(1)}}^{(0)} \\ \mathbf{Q}_{1^{(1)}}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_{N_{nd}^{(1)}}^{(0)} \end{array} \right] \quad (6.83)$$

und Gl. (6.56) somit

$$\text{range}(\mathbf{B}^{(0)}) = \text{range}(\mathbf{Q}^{(0)}) \subset \text{range}(\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}) \quad (6.84)$$

Gl. (6.76) lautet dann ausführlich:

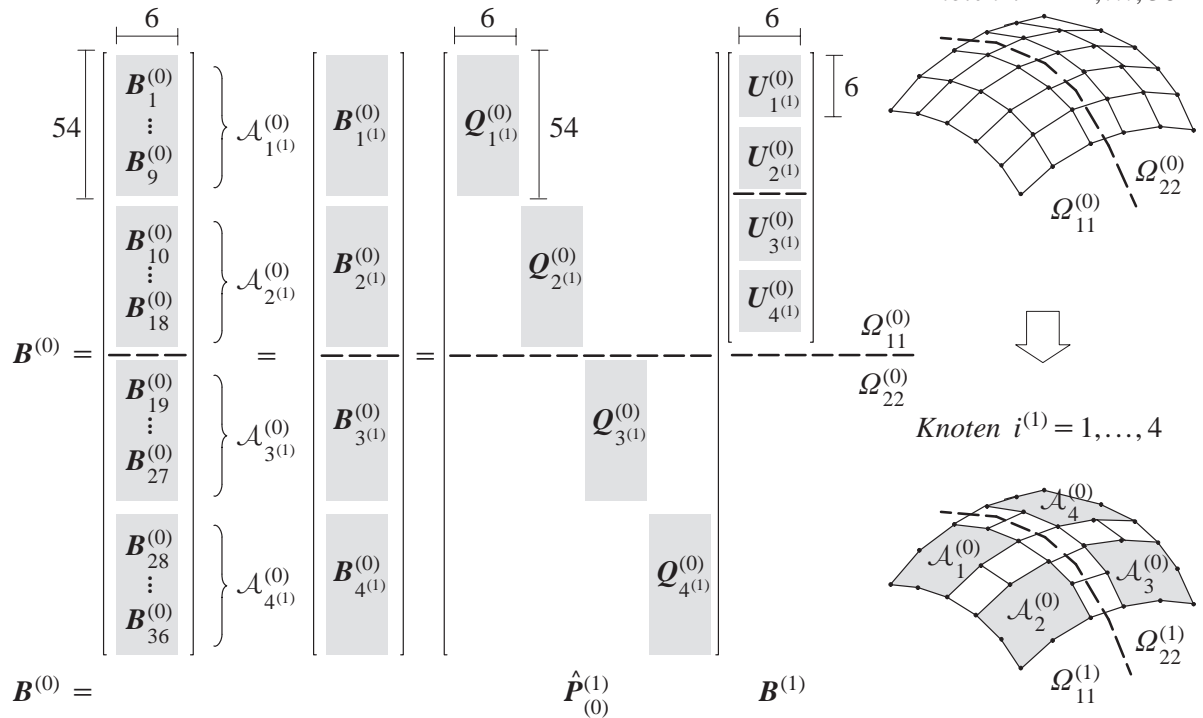
$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{1^{(1)}}^{(0)} \\ \mathbf{B}_{2^{(1)}}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{N_{nd}^{(1)}}^{(0)} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{1^{(1)}}^{(0)} & & & \\ & \mathbf{Q}_{2^{(1)}}^{(0)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{Q}_{N_{nd}^{(1)}}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_{1^{(1)}}^{(0)} \\ \mathbf{U}_{2^{(1)}}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathbf{U}_{N_{nd}^{(1)}}^{(l-1)} \end{bmatrix} \\
 \mathbf{B}^{(0)} &= \hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} \mathbf{B}^{(1)} .
 \end{aligned} \tag{6.85}$$

Die Grobgitterknoten $i^{(1)}$ können dann wiederum zu Aggregaten $\mathcal{A}_{i^{(2)}}^{(1)}$, $i^{(2)} = 1, \dots, N_{nd}^{(2)}$ zusammengefasst werden, womit sich aus $\mathbf{B}^{(1)}$ die Matrix $\mathbf{B}^{(2)}$ und Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(2)}$ durch erneute Anwendung von Gl. (6.81)–(6.85) ergeben. Für drei Level und einer exemplarischen Aggregation bei einer Gebietszerlegung von $\Omega_{(0)}$ in zwei Teilgebiete $\Omega_{11}^{(0)}$ und $\Omega_{22}^{(0)}$ ist die parallele Bildung der Matrizen $\mathbf{B}^{(l-1)}$, $\hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}$, $l = 1, 2$ in Abb. 6.15 schematisch zusammengestellt. Die endgültigen Prolongationen ergeben sich durch Glättung Gl. (6.52).

a) Knotenblöcke der Starrkörpermoden nach Gl. (6.79):

$$\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)}(\mathbf{x}_{i^{(0)}}, \mathbf{a}_3, \hat{\mathbf{x}}) = \left[\begin{array}{c} \mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)} \end{array} \right]_6$$

b) Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}$ und $\mathbf{B}^{(1)}$ von $\Omega_{(1)}$:



c) Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(2)}$ und $\mathbf{B}^{(2)}$ von $\Omega_{(2)}$:

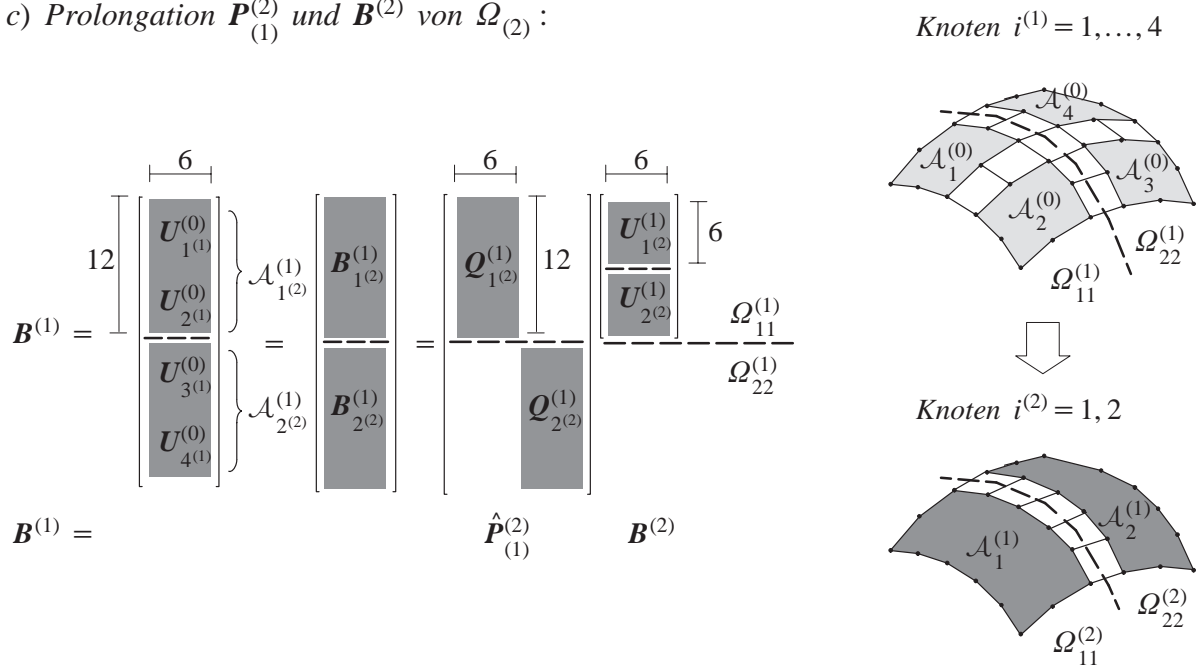


Abb. 6.15: parallele Bildung der vorläufigen Prolongationen (schematische Darstellung)

Es muss nun noch die Behandlung der Dirichlet–Randbedingungen und die modifizierte Gram–Schmidt–Orthogonalisierung genauer betrachtet werden. Dabei wird davon ausgegangen, dass Gleichungen gelagerter Freiheitsgrade vorab aus dem Gleichungssystem $\mathbf{A}_{(0)}$ der Feinleveldiskretisierung $\Omega_{(0)}$ nach Gl. (4.45) eliminiert wurden. Die Anzahl der Unbekannten (und zugehörigen Gleichungen) eines Knotens $i^{(0)}$ kann somit $N_i^{dof} < 6$ betragen. Bei der Aufstellung der Repräsentation der Starrkörpermoden $\mathbf{B}^{(0)}$ wird dem Rechnung getragen, indem aus dem zu Knoten $i^{(0)}$ gehörigen Knotenblock $\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_i^{dof} \times rbm}$ die zu den gelagerten Freiheitsgraden von $i^{(0)}$ gehörenden Zeilen entfernt werden. Gl. (6.86) zeigt dies für einen Knoten mit Lagerbedingung $v_2 = 0$ (Mittelflächenverschiebung in Richtung der i_2 –Achse):

$$\tilde{\mathbf{B}}_{i^{(0)}}^{(0)} = \begin{array}{cccccc|c} b_1 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 & b_6 & \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & x_3^i - \hat{x}_3 & -x_2^i + \hat{x}_2 & v_1 \\ 0 & 0 & 1 & x_2^i - \hat{x}_2 & -x_1^i + \hat{x}_1 & 0 & v_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_3^3 & -a_3^2 & w_1 \\ 0 & 0 & 0 & -a_3^3 & 0 & a_3^1 & w_2 \\ 0 & 0 & 0 & a_3^2 & -a_3^1 & 0 & w_3 \end{array} \quad (6.86)$$

Wird nun ein Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$ aus Knoten mit solchen Lagerbedingungen gebildet, so reduziert sich entsprechend die Zeilendimension $n_{i^{(1)}}$ des mit diesem Aggregat assoziierten Blocks $\tilde{\mathbf{B}}_{i^{(1)}}^{(0)} \in \mathbb{R}^{n_{i^{(1)}} \times rbm}$ von $\mathbf{B}^{(0)}$. Die Spaltenvektoren $\mathbf{b}_m^{\mathcal{A}_i}$ von $\tilde{\mathbf{B}}_{i^{(1)}}^{(0)}$ sind dann nicht mehr notwendigerweise linear unabhängig. Dies tritt genau dann auf, wenn die Lagerung der zu $\mathcal{A}_{i^{(1)}}^{(0)}$ aggregierten Knoten dergestalt ist, dass eine oder mehrere Starrkörperbewegungen des Aggregats vollständig behindert sind.

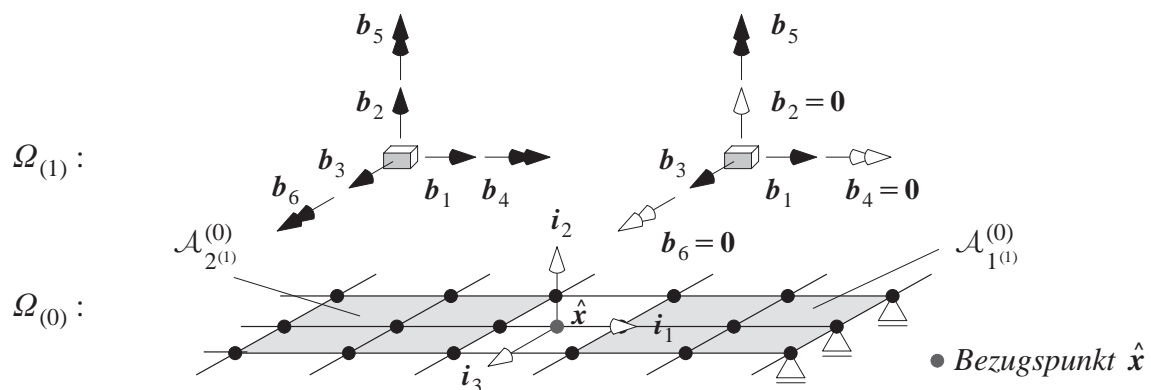


Abb. 6.16: Übergang von Lagerbedingungen auf Groblevel (exemplarisch)

Das um eine oder mehrere Starrkörperbewegungen 'beraubte' Aggregat hat auf diese Weise die Lagerbedingungen der ihm zugrundeliegenden Knoten übernommen. Abb. 6.16 zeigt dies exemplarisch für ein Aggregat $\mathcal{A}_{1^{(1)}}^{(0)}$, das aufgrund der Randbedingungen von $\Omega_{(0)}$ Lagerbedingungen $\mathbf{b}_2^{\mathcal{A}_1} = \mathbf{0}$, $\mathbf{b}_4^{\mathcal{A}_1} = \mathbf{0}$ und $\mathbf{b}_6^{\mathcal{A}_1} = \mathbf{0}$ erhält.

Für den Fall, dass die Spalten $\mathbf{b}_m^{A_i}$ von $\tilde{\mathbf{B}}_{i(1)}^{(0)}$ nicht linear unabhängig sind, ist die Konstruktion einer orthogonalen Basis $\mathbf{Q}_{i(1)}^{(0)}$ von $\tilde{\mathbf{B}}_{i(1)}^{(0)}$ (Gl. (6.81)) nicht möglich. Während der Gram–Schmidt–Orthogonalisierung treten entweder Nullspalten $\mathbf{Q}_{*m} = \mathbf{0}$ für jeden festgehaltenen Mode m auf, oder es sind nicht orthogonalisierbare Nullspalten von vornherein in $\mathbf{B}_{i(1)}^{(0)}$ enthalten.

$$\begin{array}{l}
 m\text{GramSchmidt}(\mathbf{B}_{\mathcal{A}}, \text{rbm}, \mathbf{Q}_{\mathcal{A}}, \mathbf{U}_{\mathcal{A}}) \\
 \left[\begin{array}{l}
 k = 1 \\
 U_{kk} = 0 \\
 \text{Solange } U_{kk} = 0 \\
 \left[\begin{array}{l}
 U_{kk} \leftarrow \sqrt{(\mathbf{B}_{*k}, \mathbf{B}_{*k})} \\
 \text{Wenn } U_{kk} = 0 \\
 \left| \begin{array}{l}
 k \leftarrow k + 1 \\
 \text{sonst} \\
 \left[\begin{array}{l}
 \mathbf{B}_{*k} \leftarrow \frac{\mathbf{B}_{*k}}{U_{kk}} \\
 \text{Wenn } k = \text{rbm} \text{ Ende}
 \end{array} \right. \\
 \text{Für } j = k + 1 \text{ bis } \text{rbm} \\
 \left[\begin{array}{l}
 \text{Für } i = 1 \text{ bis } j - 1 \\
 \left[\begin{array}{l}
 U_{ij} \leftarrow (\mathbf{B}_{*i}, \mathbf{B}_{*j}) \\
 \mathbf{B}_{*j} \leftarrow \mathbf{B}_{*j} - U_{ij} \mathbf{B}_{*i}
 \end{array} \right. \\
 U_{jj} \leftarrow \sqrt{(\mathbf{B}_{*j}, \mathbf{B}_{*j})} \\
 \text{Wenn } U_{jj} > 0 \\
 \left[\begin{array}{l}
 \mathbf{B}_{*j} \leftarrow \frac{\mathbf{B}_{*j}}{U_{jj}}
 \end{array} \right. \\
 \mathbf{Q}_{\mathcal{A}} \leftarrow \mathbf{B}_{\mathcal{A}}
 \end{array} \right.
 \end{array} \right.
 \end{array} \right.
 \end{array}$$

Abb. 6.17: modifizierte Gram–Schmidt–Orthogonalisierung

Es wird daher die in Abb. 6.17 angegebene modifizierte Gram–Schmidt–Orthogonalisierung verwendet, die solche Nullspalten berücksichtigt. Die resultierenden Nullspalten in $\mathbf{Q}_{i(1)}$ führen nach Gl. (6.85) zu Nullspalten in der Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(l-1)}^{(l)}$ und somit zu Nullspalten und –zeilen in der Grobgitterkoeffizientenmatrix $\mathbf{A}_{(l)} = \mathbf{R}_{(l-1)}^{(l)} \mathbf{A}_{(l-1)} \mathbf{P}_{(l-1)}^{(l)}$. Durch Entfernen dieser Nullspalten und –zeilen von $\mathbf{A}_{(l)}$ wird diese positiv–definit. Durch die entsprechenden Nulleinträge auf der Hauptdiagonalen von $\mathbf{U}_{i(1)}$ gehen die Lagerbedingungen mit Gl. (6.85) auch auf das nächst–größere Level über.

6.4.4 Geometrische Ermittlung der Starrkörpermoden der Groblevel

Es wird nun eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Variante des Smoothed–Aggregation–Multigrid vorgestellt, die ohne die verhältnismäßig teure Gram–Schmidt–Orthogonalisierung auskommt. Hierzu soll nun mit jedem Grobgitterknoten $i^{(l)}$ von $\Omega_{(l)}$, der ein Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ repräsentiert, ein geometrischer Ort $\bar{\mathbf{x}}^{i^{(l)}}$ assoziiert werden. Dieser wird als geometrisches Mittel aller Knoten $i^{(l-1)}$ von $\mathcal{A}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$ gewählt:

$$\bar{\mathbf{x}}^{i^{(l)}} = \frac{1}{N_{nd}^{\mathcal{A}}} \sum_{i^{(l-1)} \in \mathcal{A}_{i^{(l)}}^{(l-1)}} \mathbf{x}^{i^{(l-1)}} , \quad (6.87)$$

mit $N_{nd}^{\mathcal{A}}$ als Anzahl Knoten $i^{(l-1)}$ im Aggregat $\mathcal{A}_{i^{(l)}}^{(l-1)}$. Die Starrkörpermoden des Aggregats werden nun bezüglich des Bezugspunktes $\bar{\mathbf{x}}^{i^{(1)}}$ aufgestellt. Auf dem Feinlevel $\Omega_{(0)}$ gilt für einen Knotenblock $\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)}$ von $\mathbf{B}^{(0)}$ analog zu Gl. (6.79) mit \mathbf{a}_3 als Schalendirektor im Knoten $\mathbf{x}^{i^{(0)}}$:

$$\mathbf{B}_{i^{(0)}}^{(0)} = \left(\begin{array}{cccccc|c} \text{Knoten } i^{(1)} & & & & & & \\ v_1 & v_2 & v_3 & \phi_{i_1} & \phi_{i_2} & \phi_{i_3} & \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & x_3^{i^{(0)}} - \bar{x}_3^{i^{(1)}} & -x_2^{i^{(0)}} + \bar{x}_2^{i^{(1)}} & v_1 \\ 0 & 1 & 0 & -x_3^{i^{(0)}} + \bar{x}_3^{i^{(1)}} & 0 & x_1^{i^{(0)}} - \bar{x}_1^{i^{(1)}} & v_2 \\ 0 & 0 & 1 & x_2^{i^{(0)}} - \bar{x}_2^{i^{(1)}} & -x_1^{i^{(0)}} + \bar{x}_1^{i^{(1)}} & 0 & v_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_3^3 & -a_3^2 & w_1 \\ 0 & 0 & 0 & -a_3^3 & 0 & a_3^1 & w_2 \\ 0 & 0 & 0 & a_3^2 & -a_3^1 & 0 & w_3 \end{array} \right) \text{ Knoten } i^{(0)} . \quad (6.88)$$

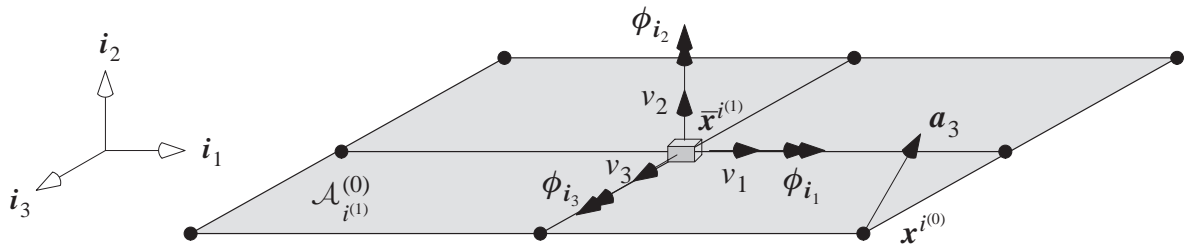


Abb. 6.18: Feinlevelaggregat und Groblevelknoten mit Rotationsfreiheitsgraden

Man kann demnach die Freiheitsgrade des Grobgitterknotens $i^{(1)}$ im Punkt $\bar{\mathbf{x}}^{i^{(1)}}$ mit den drei Translationen und den drei Rotationen um die Achsen des kartesischen Koordinatensystems identifizieren. Abb. 6.18 veranschaulicht dies geometrisch. Bis hier ist das Vorgehen mit demjenigen nach Vanek et al. (2001) identisch. Auf die Ermittlung einer orthogonalen Basis $\mathbf{Q}_{i^{(1)}}^{(0)}$ von $\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)}$ nach Gl. (6.81) wird jetzt jedoch verzichtet. Vielmehr werden die aggregatweisen Blockmatrizen $\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)}$ selbst verwendet, um die vorläufige Prolongation $\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)}$ zu erstellen:

$$\hat{\mathbf{P}}_{(0)}^{(1)} = \text{blockdiag} \left(\mathbf{B}_{i^{(1)}}^{(0)} \right)_{i^{(1)}=1, \dots, N_{nd}^{(1)}} . \quad (6.89)$$

Da ein expliziter geometrischer Ort für jeden 'Groblevelknoten' vorliegt, lässt sich die Konstruktion der vorläufigen Prolongationen auf den Grobleveln $\Omega_{(l)}$, $l > 0$ nach der gleichen Logik wie auf $\Omega_{(0)}$ vornehmen. Es ist jedoch zu beachten, dass die Knotenfreiheitsgrade eines Groblevel $\Omega_{(l)}$ nun keine Mittelflächen- und Differenzvektorverschiebungen sind, sondern die Translationen und Rotationen bezüglich kartesischer Achsen. Demnach ergibt sich ein Knotenblock $\mathbf{B}_{i^{(l)}}^{(l)}$ von $\mathbf{B}^{(l)}$ nun zu:

$$\begin{array}{c}
 \text{Knoten } i^{(l+1)} \\
 \left. \begin{array}{cccccc}
 v_1 & v_2 & v_3 & \phi_{i_1} & \phi_{i_2} & \phi_{i_3}
 \end{array} \right\} \\
 \mathbf{B}_{i^{(l)}}^{(l)} = \left[\begin{array}{cccccc}
 1 & 0 & 0 & 0 & x_3^{i^{(l)}} - \bar{x}_3^{i^{(l+1)}} & -x_2^{i^{(l)}} + \bar{x}_2^{i^{(l+1)}} \\
 0 & 1 & 0 & -x_3^{i^{(l)}} + \bar{x}_3^{i^{(l+1)}} & 0 & x_1^{i^{(l)}} - \bar{x}_1^{i^{(l+1)}} \\
 0 & 0 & 1 & x_2^{i^{(l)}} - \bar{x}_2^{i^{(l+1)}} & -x_1^{i^{(l)}} + \bar{x}_1^{i^{(l+1)}} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
 \end{array} \right] \left. \begin{array}{l}
 v_1 \\
 v_2 \\
 v_3 \\
 \phi_{x_1} \\
 \phi_{x_2} \\
 \phi_{x_3}
 \end{array} \right\} \text{Knoten } i^{(l)}
 \end{array} \quad (6.90)$$

Abb. 6.19 veranschaulicht dies an einem 'Aggregat aus Aggregaten'.

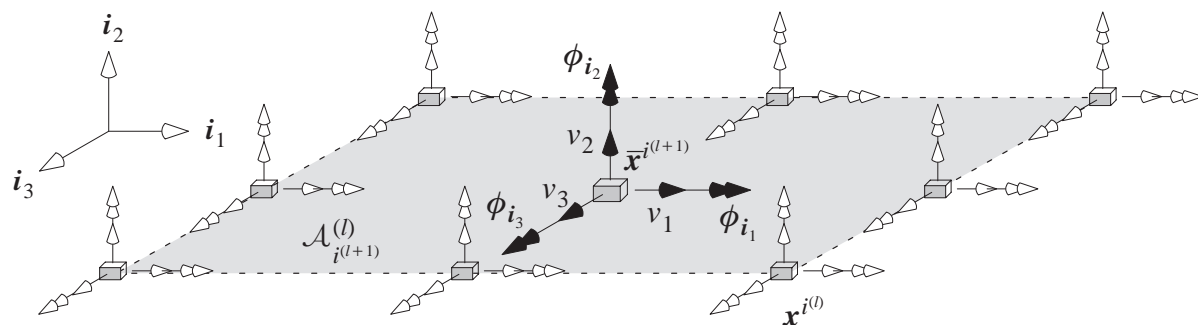


Abb. 6.19: Groblevelaggregat auf $\Omega_{(l)}$ und repräsentierender Knoten auf $\Omega_{(l+1)}$, $l > 0$
 Die Prolongation zwischen $\Omega_{(l+1)}$ und $\Omega_{(l)}$ folgt analog zu Gl. (6.89)

$$\hat{\mathbf{P}}_{(l)}^{(l+1)} = \text{blockdiag}_{i^{(l+1)}=1, \dots, N_{nd}^{(l+1)}} \left(\mathbf{B}_{i^{(l+1)}}^{(l)} \right), \quad l = 1, \dots, L-1. \quad (6.91)$$

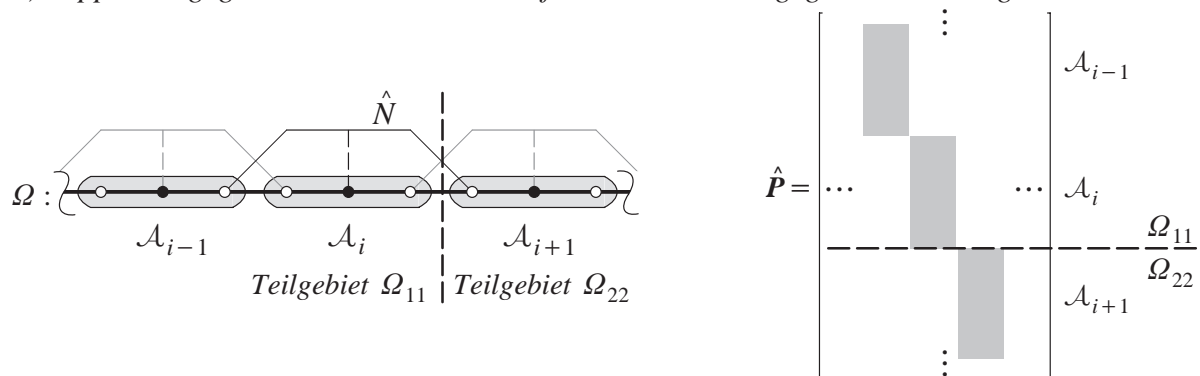
Die endgültigen Prolongationen erhält man wiederum durch Glättung der Prolongation. Für diese auf Anschauung basierende Variante des Aggregation-Multigrid fehlen natürlich die Konvergenzanalysen, wie sie für den Smoothed-Aggregation-Multigrid in Kap. 6.4.3 von Vaneck et al. (2001) gegeben werden. Auch kann gezeigt werden, dass im Falle einer nicht gekrümmten Struktur (dass heißt einer Platte oder Scheibe) das Vorgehen identisch ist mit demjenigen aus Kap. 6.4.3. Bei gekrümmten Strukturen entsteht ein Fehler in der Geometriebeschreibung in Gl. (6.87), der zu einer von der Krümmung der Aggregate abhängigen

gen Fehler in den in Gl. (6.90) angesetzten Starrkörpermoden der Groblevel führt. Die numerischen Beispiele in Kap. 6.6 zeigen jedoch ein gleichwertiges Verhalten der beiden Varianten.

6.4.5 Auswirkungen der Prolongationsglättung auf die parallele Implementierung

Die Prolongationsglättung Gl. (6.52) führt zu einer deutlich verbesserten Konvergenz des Multigrid-Algorithmus. Sie verursacht jedoch auch eine Vergrößerung des Supports der Groblevelansatzfunktionen und dadurch eine Erhöhung der numerischen Kosten. Um dies zu veranschaulichen wird das eindimensionale Modellproblem aus Kap. 6.4.1, Abb. 6.8 erneut aufgegriffen. Abb. 6.20a) zeigt die ungeglätteten aggregatweise konstanten Ansatzfunktionen eines Groblevels (deren diskrete Repräsentation die Spalten von $\hat{\mathbf{P}}$ bilden) und schematisch die zugehörige Prolongation $\hat{\mathbf{P}}$ bei einer exemplarischen Aufteilung der Struktur in zwei Teilgebiete/Prozesse. Die Speicherung der dünnbesetzten Prolongation erfolgt hier in dem in Kap. 3.4.1 beschriebenen DCSR-Speicherformat verteilt über die einzelnen Prozesse.

a) Support ungeglätteter Groblevelansatzfunktionen und ungeglättete Prolongation



b) Support ungeglätteter Groblevelansatzfunktionen und geglättete Prolongation

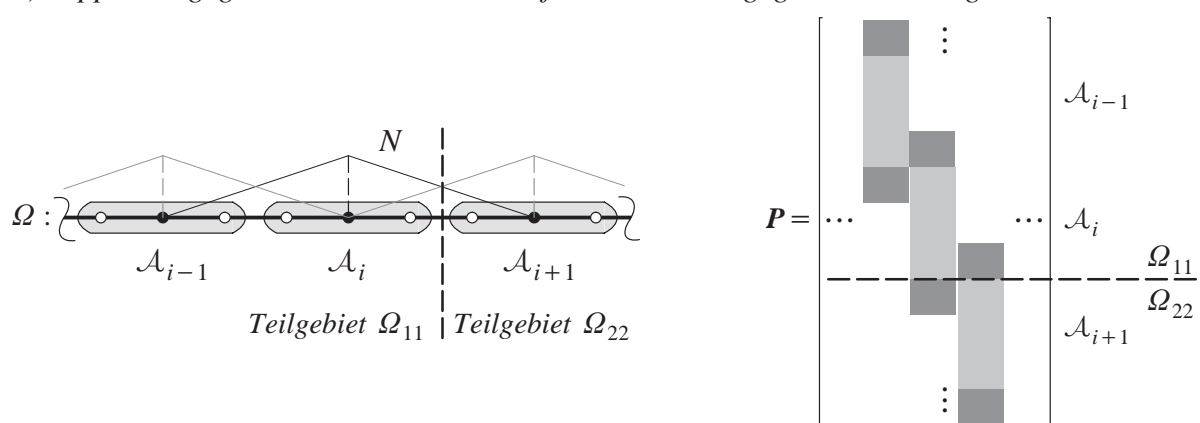


Abb. 6.20: Vergrößerung des Support der Groblevelansatzfunktionen durch Prolongationsglättung und resultierende Überlappung der Prolongation auch über Teilgebietsgrenzen hinweg (schematische Darstellung)

Bei der Anwendung der Prolongation $\hat{\mathbf{P}}$ beziehungsweise der Restriktion $\hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{P}}^T$ auf einen verteilten Vektor \mathbf{r} beziehungsweise \mathbf{z} im Multigrid-Algorithmus Gl. (6.30) ist keine Kommunika-

tion unter den Prozessen erforderlich. Durch die Prolongationsglättung erhält man die in Abb. 6.20b) schematisch dargestellte Belegungsstruktur von \mathbf{P} . Wird diese geglättete Prolongation/Restriktion auf einen verteilten Vektor angewandt, so ist aufgrund der Überlappung über die Teilgebietsgrenzen hinweg eine Kommunikation unter Prozessen benachbarter Teilgebiete nötig. Zusätzlich erhöht sich der Prolongations- und Restriktionsaufwand insgesamt durch die dichtere Belegung von \mathbf{P} und \mathbf{R} . Eine geglättete Prolongation führt dadurch auch zu zusätzlichen Kosten und Kommunikationen bei der Bildung der Galerkin-Groblevelsteifigkeitsmatrizen $\mathbf{A}_{(l)} = \mathbf{R}_{(l-1)}^T \mathbf{A}_{(l-1)} \mathbf{P}_{(l-1)}$, zu dichter besetzten Groblevelsteifigkeitsmatrizen und somit zu erheblichen Mehrkosten in der Vorkonditionierung (Fehlerglättung) beziehungsweise direkten Lösung auf den Grobleveln.

Diese 'Verteuerung' eines Multigrid-Vorkonditionierungsschrittes muss über die bessere Konvergenz und die dadurch insgesamt geringere Anzahl an V-Zyklen amortisiert werden, was jedoch bei nicht optimaler Wahl des Dämpfungsparameters ω der Prolongationsglättung nicht selbstverständlich ist. Es muss noch erwähnt werden, dass hier auch die Qualität der parallelen Implementierung einen entscheidenden Einfluss darauf hat, ob eine Beschleunigung des Lösungsprozesses durch Prolongationsglättung erzielt wird.

6.5 Kombinierte SDC- / AMG-Vorkonditionierung

Der SDC-Ansatz aus Kap. 5 lässt sich vorteilhaft und einfach mit der hier vorgestellten Multigrid-Vorkonditionierung kombinieren. Hierzu muss lediglich die Repräsentation der Starrkörpermoden $\mathbf{B}^{(0)}$ auf dem feinen Level $\Omega_{(0)}$ angepasst werden.

Mit $\hat{\mathbf{x}}$ als Bezugspunkt und dem skalierten Direktor $\mathbf{a}_3^c = \mathcal{C}\mathbf{a}_3$ am Knoten $\mathbf{x}^{i(0)}$ gilt für einen Knotenblock $\mathbf{B}_{i(0)}^{(0)c}$ nach Gl. (6.79) beziehungsweise (6.88) dann:

$$\mathbf{B}_{i(0)}^{(0)c} = \begin{array}{c} \left. \begin{array}{ccccccc} & \overbrace{\phantom{v_1 \quad v_2 \quad v_3 \quad \phi_{i_1} \quad \phi_{i_2} \quad \phi_{i_3}}}^{\text{Knoten } i^{(1)}} & & & & & \\ v_1 & v_2 & v_3 & \phi_{i_1} & \phi_{i_2} & \phi_{i_3} & \\ \left[\begin{array}{cccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & x_3^{i(0)} - \hat{x}_3 & -x_2^{i(0)} + \hat{x}_2 \\ 0 & 1 & 0 & -x_3^{i(0)} + \hat{x}_3 & 0 & x_1^{i(0)} - \hat{x}_1 \\ 0 & 0 & 1 & x_2^{i(0)} - \hat{x}_2 & -x_1^{i(0)} + \hat{x}_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathcal{C}a_3^3 & -\mathcal{C}a_3^2 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathcal{C}a_3^3 & 0 & \mathcal{C}a_3^1 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{C}a_3^2 & -\mathcal{C}a_3^1 & 0 \end{array} \right] & \left. \begin{array}{c} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ w_1^c \\ w_2^c \\ w_3^c \end{array} \right\} \text{Knoten } i^{(0)} \end{array} \right. \end{array} \quad (6.92)$$

Die Matrizen $\mathbf{B}^{(l)}$, $l > 0$ werden, wie in Kap. 6.4.3 oder Kap. 6.4.4 beschrieben, ohne jegliche Modifikation ermittelt.

Die Groblevelprobleme haben aufgrund ihrer Parametrisierung mit Verschiebungen und Rotationen auch ohne eine Kombination mit SDC nicht die (zusätzliche) Empfindlichkeit bezüglich der Schlankheit der Struktur, wie sie für die Differenzvektorformulierung in Kap. 5 diskutiert wurde. Das Eigenwertspektrum der Grobgittersteifigkeitsmatrizen ist daher demjenigen einer klassischen 5-Parameter-Schalenformulierung mit Rotationsfreiheitsgraden ähnlich und im allgemeinen daher deutlich besser konditioniert als das Feinlevelproblem.

Aufgrund dieser Parametrisierung der Groblevelprobleme mit Rotationsfreiheitsgraden ändert sich an den Groblevelsteifigkeitsmatrizen durch eine Kombination mit SDC mittels Gl. (6.92) nichts.

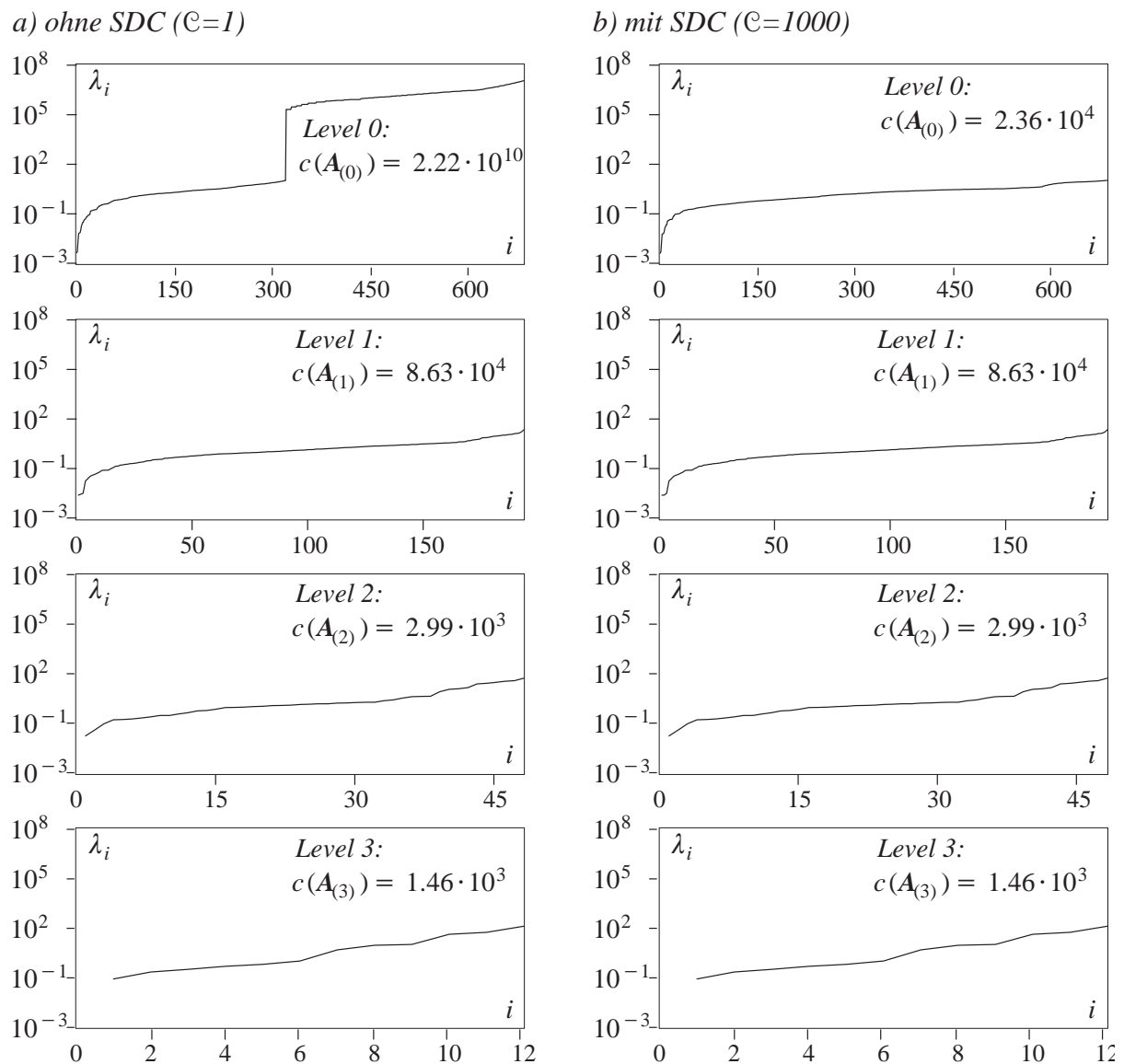


Abb. 6.21: Eigenwertspektren der Grobgittersteifigkeitsmatrizen mit und ohne Kombination mit SDC für Quadratplatte aus Abb. 5.1

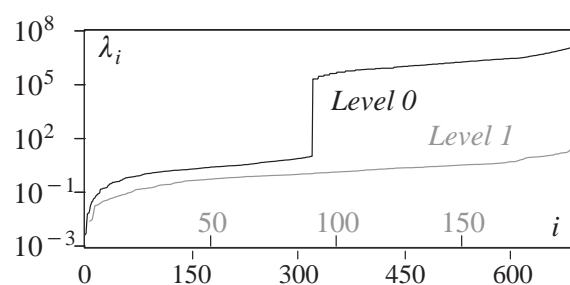
Um dies zu demonstrieren, soll das Beispiel der Quadratplatte aus Kap. 5.1, Abb. 5.1 und Abb. 5.4 aufgegriffen werden. Es werden sowohl für die unmodifizierte als auch für die SDC-vorkon-

ditionierte Feinlevel–Steifigkeitsmatrix mit 682 Unbekannten drei Groblevelprobleme mit 192, 48 und 12 Unbekannten nach Kap. 6.4.4 mit geglätteten Prolongationen erzeugt. Die Eigenwertspektren der Fein– und Groblevelsteifigkeitsmatrizen sind in Abb. 6.21 angegeben.

Die Kontraktion des Eigenwertspektrums und die Reduktion der Konditionszahl der Feinlevelsteifigkeitsmatrix durch SDC wurde bereits in Abb. 5.8 gezeigt und diskutiert. Die Groblevelspektren sind mit und ohne Kombination mit SDC identisch und entsprechen im Bereich der langwelligen Biege– und Membranmoden dem Feinlevelspektrum sehr gut. In Abb. 6.22 wurden die Eigenwertspektren der Feinlevelsteifigkeitsmatrix (Level 0) mit denjenigen der ersten Groblevelsteifigkeitsmatrix (Level 1) übereinandergelegt. Man erkennt in Abb. 6.22b) deutlich die gute spektrale Übereinstimmung der SDC–vorkonditionierten Feinlevelmatrix und der durch SDC gänzlich unbeeinflussten Groblevelsteifigkeit.

Werden SDC– und AMG–Vorkonditionierung kombiniert, so kann ein besseres Glättungsverhalten auf dem Feinlevel erwartet werden.

a) ohne SDC ($C=1$)



b) mit SDC ($C=1000$)

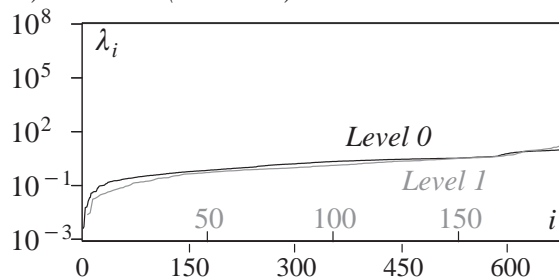


Abb. 6.22: Eigenwertspektren der Level 0 und Level 1 Steifigkeitsmatrix für *Quadratplatte* aus Abb. 5.1

Die in Kap. 5.5 gezeigte Reduktion der Iterations– und Löserzeiten durch SDC dürfte daher in Kombination mit der AMG–Vorkonditionierung relativ gesehen geringer ausfallen, was an einem Beispiel in Kap. 6.6.2 demonstriert wird.

6.6 Beispiele

6.6.1 Rohrkreuzung

Es soll zunächst der Einfluss der parallelen Multigrid–Vorkonditionierung auf das Konvergenzverhalten des CG–Verfahrens gezeigt werden. Dazu wird die in Abb. 6.23a) dargestellte Rohrkreuzung betrachtet. Die Geometrie des Beispiels ist Alefeld et al. (1997) entnommen. Der obere und untere Flansch der Rohrkreuzung ist unverschieblich gelagert, während der rechte und linke Flansch durch eine Flächenlast, wie in Abb. 6.23a) dargestellt, belastet wird. Es wird eine geometrisch nichtlineare, dynamische Berechnung mit dem Generalized– θ Zeitintegrationsverfahren (Chung und Hulbert (1993), Kuhl (1996)) und einer Newton–Raphson Gleichgewichtsiteration durchgeführt, bei der die Belastung (Abb. 6.23b)) linear gesteigert wird.

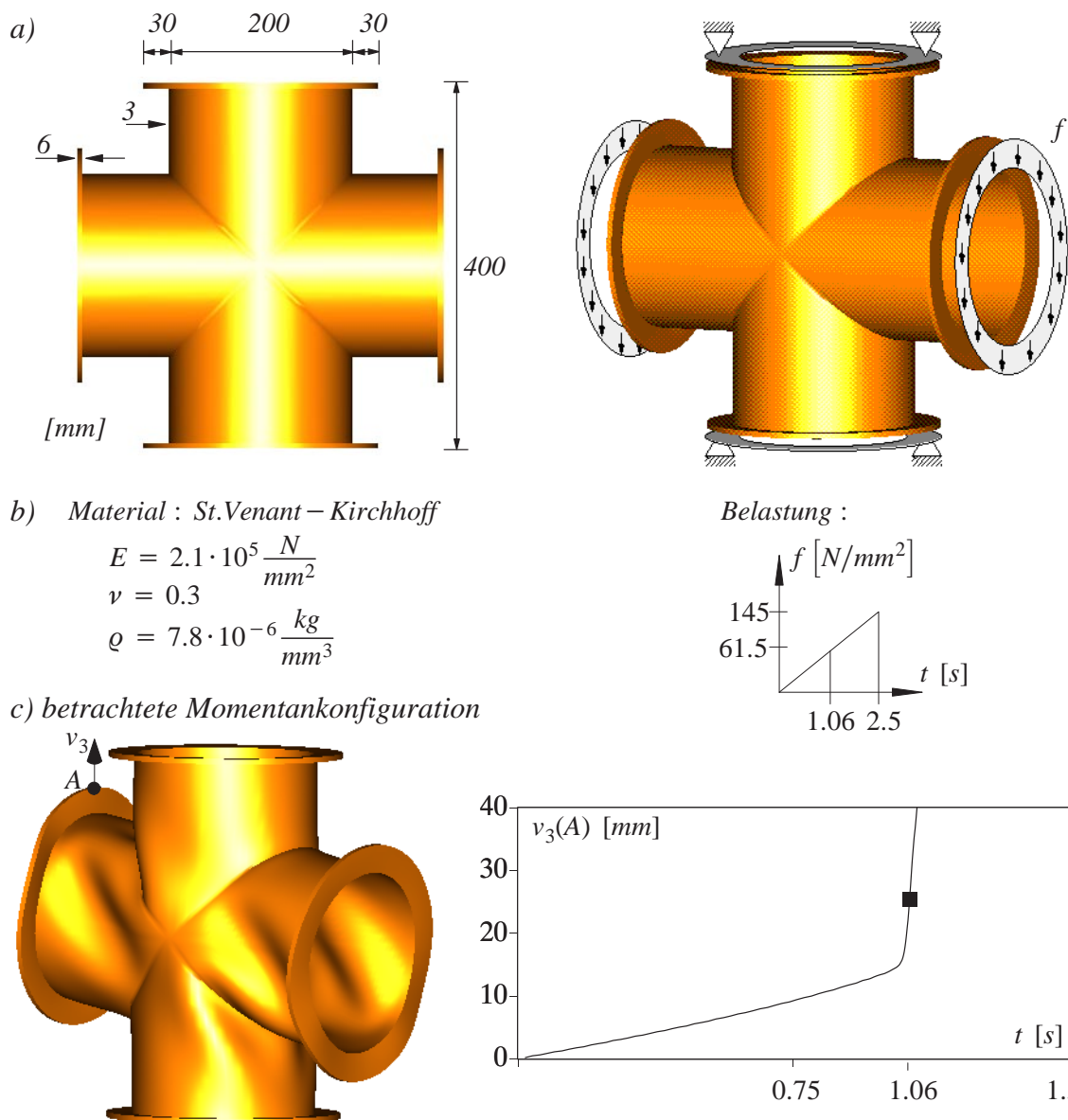


Abb. 6.23: Rohrkreuzung: Geometrie, Material und Belastung, betrachtete Konfiguration

Vereinfachend wird ein lineares Materialverhalten angenommen, obwohl die auftretenden Verzerrungen bei einem Stahlwerkstoff die Verwendung eines Plastizitätsgesetzes für große Verzerrungen erforderlich machen würden.

Bei einem Lastniveau von $f \approx 60 \text{ N/mm}^2$ tritt Beulen auf, was eine Anpassung der Zeitschrittgröße auf $\Delta t = 2 \cdot 10^{-3}$ erforderlich macht. Die Rechnung wurde zweimal mit den in Abb. 6.24 dargestellten Diskretisierungen 'Rohr13440' mit 13440 Elementen und 'Rohr25080' mit 25080 Elementen durchgeführt. Es wurden in beiden Fällen hybride, bilineare Schalenelemente der 7-Parameter-Schalenelementformulierung verwendet, die einen ANS-Ansatz (Bathe und Dvorkin (1985)) zur Interpolation der Querschubverzerrungen verwenden.

Es wird jetzt das lineare Gleichungssystem im Prediktor-Schritt des Newton-Raphson-Verfahrens zum Zeitpunkt $t = 1.06 \text{ s}$ (Abb. 6.23c) betrachtet, das mit einem vorkonditionierten CG-

Verfahren gelöst wird. Drei verschiedene parallele Vorkonditionierungen werden für beide Diskretisierungen und unterschiedliche Prozessanzahlen getestet.

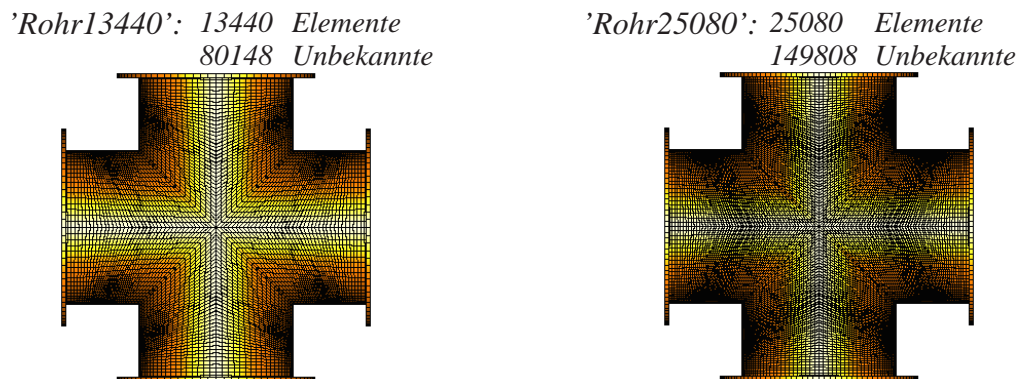


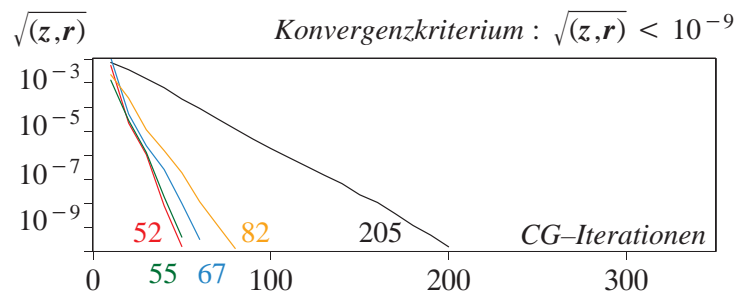
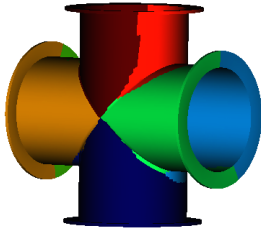
Abb. 6.24: Diskretisierungen der Rohrkreuzung

Es handelt sich bei den Vorkonditionierungen um:

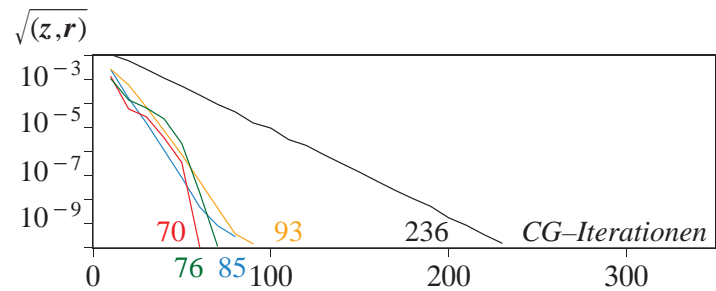
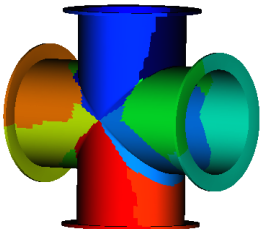
- V-Zyklus-Smoothed-Aggregation-Multigrid mit vier Leveln nach Kap. 6.4.3. Es wird eine Additiv-Schwarzsche-Glättung auf allen Leveln (mit Ausnahme des größten Levels) verwendet. Als Teilgebietsglätter wird eine ILU(1)-Faktorisierung eingesetzt. Auf dem größten Gitter wird das Gleichungssystem direkt gelöst. Die Vorkonditionierung wird einmal mit ungeglätteten Prolongationen ($\omega = 0$ in Gl. (6.52)) und mit geglätteten Prolongationen ($\omega = 0.65$) angesetzt. Diese beiden Vorkonditionierungsvarianten werden im weiteren mit 'SAMG(4)/ $\omega = 0$ ' und 'SAMG(4)/ $\omega = 0.65$ ' bezeichnet.
- V-Zyklus-Smoothed-Aggregation-Multigrid mit vier Leveln nach Kap. 6.4.4 mit geometrischer Ermittlung der Starrkörpermoden auf den Grobleveln. Alle weiteren Parameter sind mit denen der vorhergehenden Variante identisch. Diese beiden Varianten werden mit 'GAMG(4)/ $\omega = 0$ ' und 'GAMG(4)/ $\omega = 0.65$ ' bezeichnet.
- Aus Vergleichsgründen wird noch eine einfache Einlevel-Additiv-Schwarzsche-Vorkonditionierung (Kap. 4.5.3) angewandt. Als Teilgebietsvorkonditionierung wird ebenfalls eine ILU(1)-Faktorisierung verwendet. Diese Variante wird im folgenden mit 'ASM-ILU(1)' bezeichnet.

In Abb. 6.25 ist für die Diskretisierung 'Rohr13440' die Abnahme des vorkonditionierten Residuums für die verschiedenen Vorkonditionierungen aufgetragen. Es wird eine Gebietszerlegung mit 8, 12 und 16 Teilgebieten betrachtet. Deutlich erkennbar ist die wesentlich bessere Konvergenz der Multigrid-vorkonditionierten Lösungen im Vergleich zur ASM-ILU(1)-Variante.

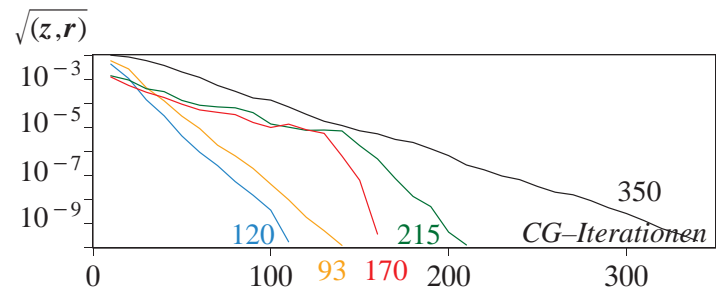
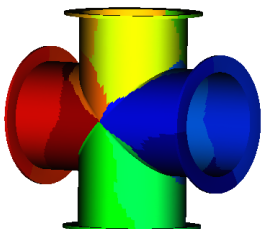
8 Teilgebiete



12 Teilgebiete



16 Teilgebiete



— GAMG(4)/ $\omega = 0$ — SAMG(4)/ $\omega = 0$
— GAMG(4)/ $\omega = 0.65$ — SAMG(4)/ $\omega = 0.65$
— ASM-ILU(1)

Abb. 6.25: Konvergenz der iterativen Lösung bei Diskretisierung 'Rohr13440'

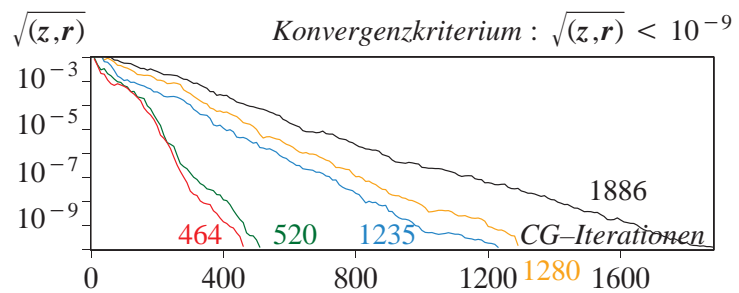
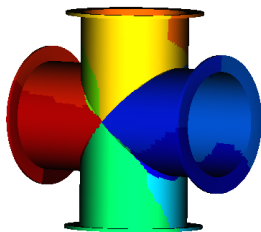
Im Falle der Gebietszerlegung in 8 und 12 Teilgebiete sind unter den beiden Multigrid-Varianten 'SAMG(4)' und 'GAMG(4)' jeweils mit und ohne Prolongationsglättung keine entscheidenden Unterschiede zu erkennen.

Bei der Einteilung in 16 Teilgebiete schneiden die Varianten ohne Prolongationsglättung besser ab als diejenigen mit geglätteten Prolongationen. Dieses Verhalten steht im Widerspruch zur Theorie, nach der die Konvergenz bei Verwendung von mit optimalem ω geglätteten Prolongationen deutlich besser ausfallen muss. Für dieses Verhalten kann folgende Erklärung gegeben werden: Form und Größe der Aggregate und der optimale Dämpfungsparameter ω , der die Gestalt der Groblevelansatzfunktionen maßgeblich beeinflusst, sind eng miteinander verknüpfte, sensitive Parameter. Der Dämpfungsparameter $\omega = 0.65$ wurde experimentell anhand einer sequentiellen Parameterstudie (also ohne Unterteilung in Teilgebiete) gewählt. Dabei entstehen aufgrund der fehlenden Beschränkung durch Teilgebietsgrenzen mehr Aggregate mit optimaler Form und Größe. Durch die Einführung der Teilgebietsgrenzen – die bei der Bildung der Aggregate respektiert werden – entstehen mehr Aggregate entlang der Teilgebietsgrenzen, die bezüglich Größe und Form vom 9-knotigen, gedrungenem Optimum abweichen. Das Zusammentref-

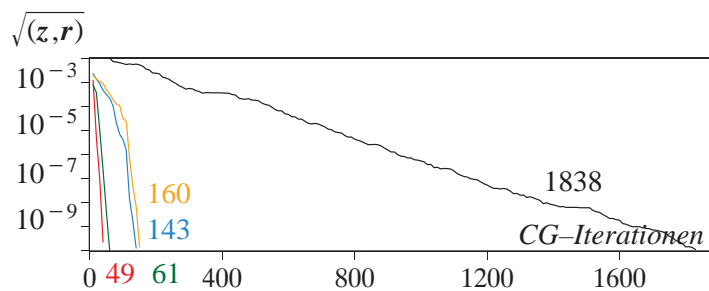
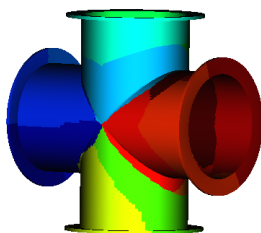
fen von 'minderwertigen' Aggregaten entlang Teilgebietsgrenzen, eines für diese Aggregate ungeeigneten Dämpfungsparameters und eine unter Umständen ungünstige Teilgebietsgeometrie können die Konvergenzgeschwindigkeit erheblich mindern.

In Abb. 6.26 sind die Konvergenzgeschwindigkeiten bei der Lösung der annähernd doppelt so feinen Diskretisierung 'Rohr25080' mit 12, 16 und 32 Teilgebieten dargestellt. Die Anzahl der benötigten CG-Iterationen bei der ASM-ILU(1)-Vorkonditionierung liegt aufgrund der größeren Anzahl an Teilgebieten und Unbekannten und der geringeren relativen Überlappungsbreite der Teilgebiete erwartungsgemäß höher als bei 'Rohr13440' in Abb. 6.25.

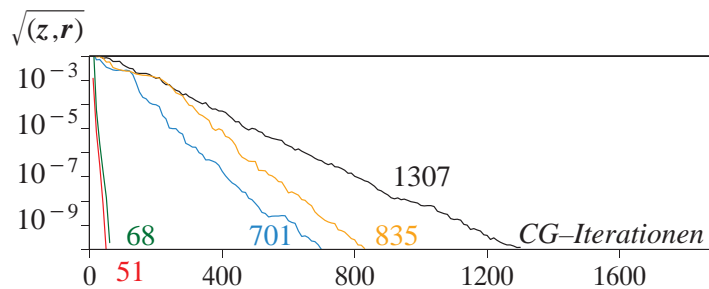
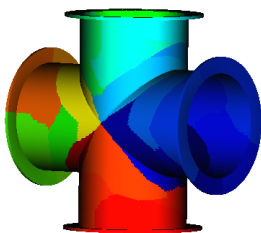
12 Teilgebiete



16 Teilgebiete



32 Teilgebiete



- GAMG(4)/ $\omega = 0$ — SAMG(4)/ $\omega = 0$
- GAMG(4)/ $\omega = 0.65$ — SAMG(4)/ $\omega = 0.65$
- ASM-ILU(1)

Abb. 6.26: Konvergenz der iterativen Lösung bei Diskretisierung 'Rohr25080'

Vergleicht man die Ergebnisse in Abb. 6.25 und 6.26, so erkennt man, dass für das doppelt so große LGS aus 'Rohr25080' nicht wesentlich mehr – bei einer Aufteilung in 32 Teilgebiete sogar weniger – Iterationen benötigt werden wie für das LGS aus 'Rohr13440'. Auch zeigt sich in Abb. 6.26 die erwartete Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit durch Prolongationsglättung deutlich.

Es muss jedoch erwähnt werden, dass geglättete Prolongationen zu wesentlich dichter besetzten Groblevelkoeffizientenmatrizen (und dadurch erhöhtem Glättungs- und Lösungsaufwand auf den groben Leveln) und zu mehr Operationen und Kommunikationen in der parallelen Restriktion und Prolongation des Residuums und der Korrektur führen, so dass ein Vorkonditionierungszyklus mit Prolongationsglättung numerisch bedeutend teurer ist als mit ungeglätteten Prolongationen. Die Gesamtlösungszeit reduziert sich durch Prolongationsglättung daher nicht in dem Ausmaß, wie es die verbesserte Konvergenz vermuten lässt. Lösungszeiten können für dieses Beispiel nicht angegeben werden, da eine alleinige Nutzung eines ausreichend großen Mehrprozessors und somit eine sinnvolle Zeitmessung nicht möglich war.

6.6.2 Rohr unter Gleichgewichtslastgruppe

Das in Abb. 6.27 dargestellte dünne Rohr wird mit einer Gleichgewichtsgruppe aus Flächenlasten an den Enden und in der Mitte belastet. Es werden 3000 hybride bilineare Schalenelemente mit ANS-Interpolation der Querschubverzerrungen verwendet, was zu einem Feinlevelgleichungssystem mit 18174 Unbekannten führt. Der Betrag der Flächenlast wird dynamisch in 22 Zeitschritten gesteigert, bis ein 'Versagen' des Rohrs durch Knicken auftritt.

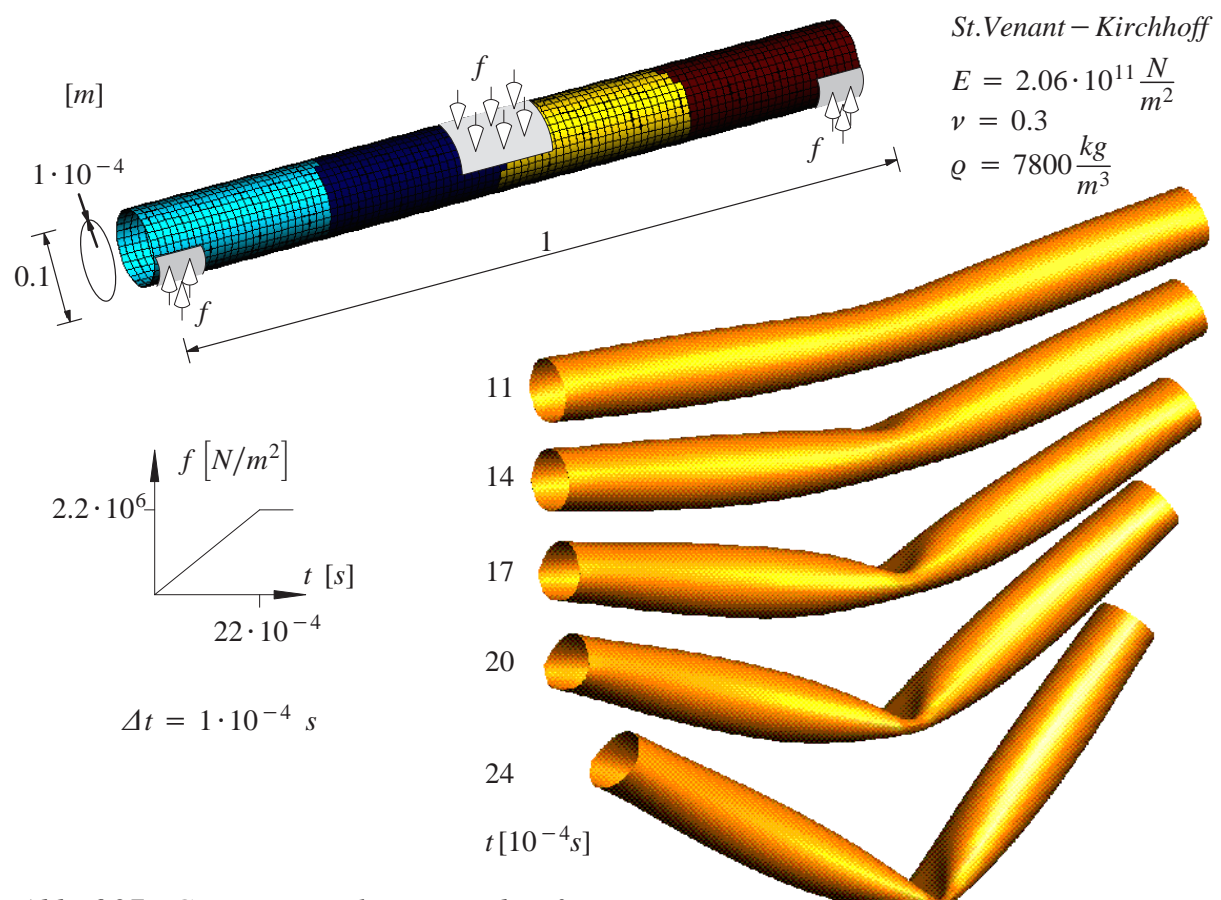


Abb. 6.27: Geometrie, Belastung und Deformation

Es wurde das Generalized- θ Zeitintegrationsverfahren mit einer Newton-Raphson Gleichgewichtsiteration verwendet. Als Gleichungslöser für das LGS wird ein paralleles vorkonditioniertes CG-Verfahren mit vier Prozessen mit folgenden zwei Arten von Vorkonditionierungen untersucht:

- V-Zyklus-Aggregations-Multigrid mit vier Leveln nach Kap. 6.4.4 mit geometrischer Ermittlung der Starrkörpermoden auf den Grobleveln und ungeglätteten Prolongationen (hier bezeichnet als 'GAMG(4)'). Als Glätter wird eine ASM-ILU(1)-Vorkonditionierung eingesetzt, das Gleichungssystem des größten Gitters wird direkt gelöst.
- Einlevel-Additiv-Schwarz-Vorkonditionierung mit ILU(1)-Vorkonditionierung auf den Teilgebieten (hier bezeichnet als 'ASM-ILU(1)').

Die Simulation wird mit beiden Varianten sowohl in Kombination mit einer SDC-Vorkonditionierung (Kap. 5) als auch ohne durchgeführt. Der optimale SDC-Skalierungsfaktor (Gl. (5.2)) ergibt sich aufgrund der Elementabmessungen zu $\mathcal{C} = 100$.

In Abb. 6.28 sind für die vier verschiedenen Kombinationen ASM-ILU(1)-Vorkonditionierung mit/ohne SDC und GAMG(4)-Vorkonditionierung mit/ohne SDC die Anzahlen der benötigten CG-Iterationen und CG-Iterationszeiten über alle Gleichungslösungsaufrufe der Simulation dargestellt.

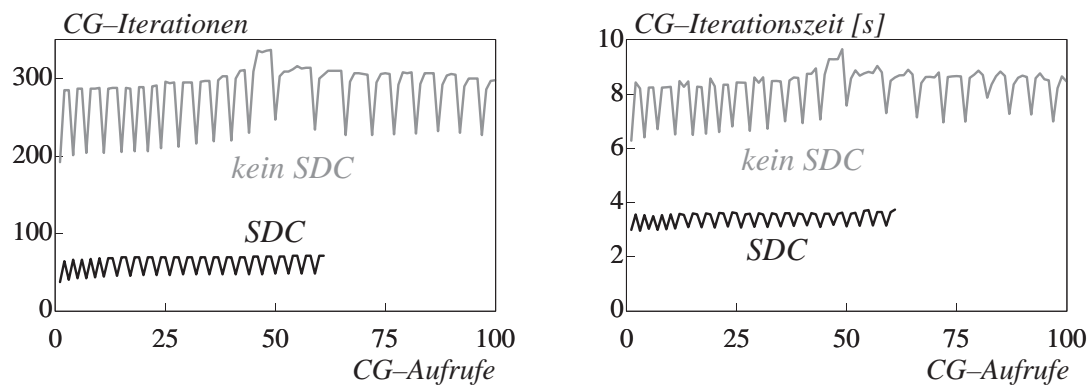
In den Varianten mit SDC-Vorkonditionierung schlägt sich die Kontraktion des Eigenwertspektrums der Koeffizientenmatrix deutlich als Reduktion der Anzahl der benötigten Iterationen nieder (Abb. 6.28a) und 6.28b)). Diese Ersparnis durch SDC geht direkt auch auf die Lösungszeiten über, da die SDC-Formulierung im Lösungsprozess selbst keinerlei zusätzliche numerische Kosten verursacht. Gleichzeitig werden durch SDC insgesamt weniger Newton-Iterationen benötigt (Im Gesamtverlauf der Simulation 61 Newton-Schritte anstatt 100 Newton-Schritte ohne SDC). Der positive Einfluss der SDC-Vorkonditionierung auch auf die Konvergenz der Newton-Iteration im Zeitschritt ist damit sehr deutlich und nicht auf eine Skalierung des Abbruchkriteriums (L_2 -Norm der residuellen Verschiebungen) der Newton-Iteration zurückzuführen, da dieses mit um den SDC-Skalierungsfaktor \mathcal{C} bereinigten Größen ausgewertet wurde.

Anmerkung: Bei der Auswertung des Konvergenzkriteriums der CG-Iteration $\sqrt{\langle \mathbf{z}, \mathbf{r} \rangle}$ wurde der SDC-Skalierungsfaktor ebenfalls herausgerechnet, so dass die in Abb. 6.28 gegebenen Iterationszahlen sich jeweils auf die gleiche Genauigkeit der Lösung des linearen Gleichungssystems beziehen.

Die Reduktion der Iterationszahl und Lösungszeit durch SDC fällt in der Kombination mit der GAMG(4)-Vorkonditionierung wie erwartet geringer aus (Abb. 6.28b)) als bei Kombination mit der Einlevel-Vorkonditionierung (Abb. 6.28a)). Dies ist – wie in Kap. 6.5 bereits angemerkt – darauf zurückzuführen, dass die Unbekannten der verwendeten Groblevel physikalisch Ver-

schiebungen und Rotationen entsprechen, die Groblevelkoeffizientenmatrizen also den für die rein verschiebungsbasierte Parametrisierung charakteristischen Sprung im Eigenwertspektrum nicht aufweisen. Die GAMG(4)–Vorkonditionierung allein reduziert die Iterationszeit um ungefähr ein Drittel (Abb. 6.28 rechts, graue Kurven), in Kombination mit SDC kann zwar eine Reduktion der Anzahl der Iterationen beobachtet werden (Abb. 6.28 links, schwarze Kurven), jedoch keine sehr deutliche Reduktion der Lösungszeit (Abb. 6.28 rechts, schwarze Kurven). Das Feinlevelgleichungssystem wird durch den SDC–Ansatz bereits so ‘gutartig’, dass die zur ASM–ILU(1)–Variante relativ höheren GAMG(4)–Vorkonditionierungskosten in diesem Beispiel nicht zu einer erheblichen Verkürzung der Lösungszeiten führen.

a) ASM–ILU(1)–Vorkonditionierung mit/ohne SDC



b) GAMG(4)–Vorkonditionierung mit ASM–ILU(1)–Glättungen mit/ohne SDC

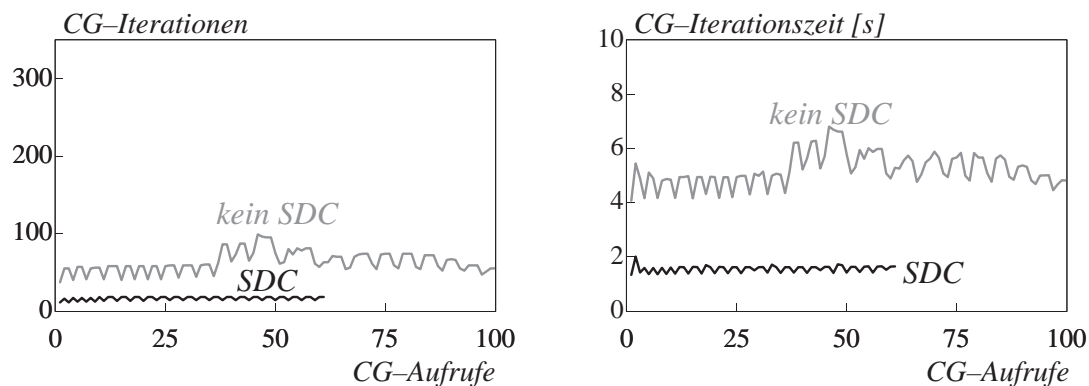


Abb. 6.28: Rohr unter Gleichgewichtslastgruppe: Anzahlen CG–Iterationen und Iterationszeiten

6.7 Ausblick

Natürlich sind einige weitere Ergänzungen, Erweiterungen und Untersuchungen des hier beschriebenen Smoothed–Aggregation–Multigrid für die 7–Parameter–Schalenformulierung wünschenswert, die im Rahmen dieser Arbeit nicht umgesetzt wurden:

- Eine Erweiterung des MG–Ansatzes auf anisotropes Materialverhalten, beziehungsweise eine Verbesserung der Bildung der Aggregate und der Prolongations-

glättung im Falle von Beul- und Faltenbildung. Aggregate sollen so gebildet werden, dass 'steife' finite Elemente in Aggregaten und 'weiche' Elemente zwischen den Aggregaten zu liegen kommen. Liegt anisotropes Verhalten vor, so kann dieses weiter bei der Glättung der Prolongation vorteilhaft berücksichtigt werden.

- Für die verwendete ASM-Glättung wäre es interessant, die Überlappungsbreiten der Teilgebiete auf den einzelnen Leveln variieren zu können.
- Neben der hauptsächlich verwendeten ILU(1)-Glättung sollten parallele Block-Gauss-Seidel-Glätter in Betracht gezogen werden. Diese können bei hinreichend großer Anzahl Teilgebiete auf einem Mehrfarben-Prinzip oder aber auf einem gemischten Jacobi/Gauss-Seidel Ansatz beruhen.
- In dieser Arbeit wurde grundsätzlich davon ausgegangen, dass ein Teilgebiet eines Level mit genau einem Prozess assoziiert ist. Es ist jedoch denkbar, dass Gruppen von Prozessen ein – entsprechend großes – Teilgebiet bearbeiten. Die Anzahl der Teilgebiete ist dann relativ geringer, was wiederum ein besseres Konvergenzverhalten verspricht. Eine Teilgebietskorrektur auf einem Level kann von einer Gruppe von Prozessen beispielsweise mit einer parallelen ILU-Faktorisierung vorgenommen werden. Ein solcher Ansatz scheint auch vor allem für die Behandlung extrem großer Probleme mit sehr vielen Prozessen geeignet.
- Es ist mittlerweile ein 'Werkzeugkasten' an parallelen Multigrid- und Aggregationsalgorithmen namens 'ML' erschienen (Tong und Tuminaro (2000), Tuminaro et al. (2002)), der bei der Entwicklung der parallelen Multigrid-Vorkonditionierung im Programm CCARAT des Instituts für Baustatik noch nicht vorlag. Durch Überarbeitung der bestehenden Implementierung und Verwendung einzelner Module von 'ML' ist die Effizienz der vorliegenden Implementierung in CCARAT sicherlich weiter zu steigern.

Neben dem verfolgten Smoothed-Aggregation-Multigrid-Ansatz gibt es eine Reihe weiterer Entwicklungen und Varianten, die vielversprechende Ansätze für Schalenprobleme darstellen. Drei solche Ansätze sollen daher hier kurz beschrieben werden.

6.7.1 Generalized Aggregation Multigrid nach Fish und Belsky (1997)

Fish und Belsky (1997) stellen eine *Generalized Aggregation Multigrid* genannte Variante vor. Bei dieser wird davon ausgegangen, dass die Elementsteifigkeitsmatrizen A_e in *nicht* assemblierter Form, sowie eine Assemblierungsvorschrift vorliegen.

Die Elementmatrizen werden dann zu disjunkten Blockmatrizen $A_{\mathcal{A}}$ der Aggregate assembliert und eine Eigenwertanalyse dieser aggregatweisen Blockmatrizen durchgeführt:

$$A_{\mathcal{A}} \phi_{\mathcal{A}} = \lambda_{\mathcal{A}} D_{\mathcal{A}} \phi_{\mathcal{A}} \quad , \quad D_{\mathcal{A}} = \text{diag}(A_{\mathcal{A}}) \quad . \quad (6.93)$$

Sind A_e (tangentielle) Steifigkeitsmatrizen, so sind die sechs niedrigsten Eigenwerte einer Blockmatrix $A_{\mathcal{A}}$ Null und die zugehörigen Eigenvektoren spannen den Kernel (die Starrkörpermoden) von $A_{\mathcal{A}}$ auf. Die zu den niedrigsten $n \geq 6$ Eigenwerten gehörenden Eigenvektoren bilden die Spalten der Prolongation, so dass ein Aggregat auf dem nächst größeren Level durch einen Knoten mit n Freiheitsgraden repräsentiert wird. Dabei kann die Approximationsgüte des Groblevel über die Anzahl n der berücksichtigten Moden eines Aggregats adaptiv und lokal angepasst werden, indem eine Schwelle γ definiert wird und alle Eigenformen mit Eigenwerten $\lambda < \gamma$ in der Prolongation berücksichtigt werden. Hierbei müssen mindestens jedoch die sechs niedrigsten Eigenformen enthalten sein, da sie den Starrkörpermoden entsprechen. Ein Vorteil dieses Ansatzes ist, dass die Repräsentation der Starrkörpermoden der Feinlevelsteifigkeitsmatrix nicht vom Anwender gegeben werden muss. Es ist also keinerlei Kenntnis über die zugrundeliegende Geometrie oder die verwendeten Finiten Elemente nötig. Ein weiterer Vorteil liegt in der beschriebenen lokalen adaptiven Anpassung der Anzahl n der berücksichtigten Aggregatsmoden. Nachteilig für einen modularen Programmaufbau ist, dass die Elementmatrizen in nicht-assemblierter Form vorliegen müssen. Aus diesem Grund wurde der Ansatz in dieser Arbeit nicht weiterverfolgt.

6.7.2 Energieoptimierung von Grobgitteransatzfunktionen nach Mandel et al. (1999)

In Mandel et al. (1999) wird eine weitere Variante des Aggregation–Multigrid vorgeschlagen. Anstatt die Prolongationen, deren Spalten auch hier eine diskrete Repräsentation der Starrkörpermoden darstellen, mittels einer gedämpften Jacobi–Glättung mit heuristisch gewähltem Dämpfungsparameter ω zu glätten, werden die ungeglätteten Grobgitteransatzfunktionen (Spalten der Prolongation) mit einem Optimierungsalgorithmus verbessert. Als Zielfunktion wird die Energie der Groblevelansatzfunktionen minimiert, als Randbedingung wird gefordert, dass $\text{kernel}(A) \subset \text{range}(P)$ weiterhin gilt und die dünnbesetzte Belegungstruktur von P erhalten bleibt. Mandel et al. (1999) geben für dieses Optimierungsproblem Sensitivitäten an und verwenden als Optimierungsalgorithmus die dem CG–Verfahren verwandte Methode des steilsten Abstiegs.

Interessant ist, dass laut Mandel et al. (1999) die nach einem Optimierungsschritt resultierende Prolongation mit der ω –Jacobi–geglätteten Prolongation bei optimalem ω identisch ist. Einige wenige weitere Optimierungsschritte verbessern die Approximationseigenschaften zusätzlich.

6.7.3 Generalized–Global–Basis–Multigrid (GGB) nach Waisman et al. (2003)

Waisman, Fish, Tuminaro und Shadid haben ihren Generalized Global Basis Multigrid (GGB) genannten Ansatz für unsymmetrische und/oder indefinite Gleichungssysteme entwickelt. Er lässt sich jedoch auch auf die hier betrachteten positiv–definiten, symmetrischen Probleme vorteilhaft anwenden.

Die Iterationsmatrix einer vorkonditionierten Iteration lautet nach Gl. (4.22)

$$\mathbf{G}(\mathbf{M}^{-1}) = (\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}) . \quad (6.94)$$

Hierin kann \mathbf{M}^{-1} eine beliebige, zum Beispiel auf Multigrid– und Gebietszerlegungsprinzipien basierende Vorkonditionierung darstellen. Die Iteration konvergiert, wenn und nur wenn der Spektralradius $\rho(\mathbf{G})$ kleiner ist als Eins, was bei indefiniten Gleichungssystemen, wie sie bei Waisman et al. betrachtet werden, nicht der Fall ist. Eine Eigenwertanalyse der Iterationsmatrix

$$(\mathbf{G} - \lambda \mathbf{I}) \boldsymbol{\phi} = 0 , \boldsymbol{\phi} \neq \mathbf{0} \quad (6.95)$$

liefert diejenigen Moden $\boldsymbol{\phi}_i$ zu Eigenwerten $|\lambda_i| > 1$, die nicht konvergent sind. Aus diesen Eigenformen wird dann eine Prolongation $\boldsymbol{\Phi}$ gebildet, deren Bildbereich den Raum der nicht konvergenten Moden aufspannt. Mit $\boldsymbol{\Phi}$ lässt sich eine GGB–Groblevelkorrektur bilden. Diese GGB–Groblevelkorrektur wird mit der ursprüngliche Vorkonditionierung \mathbf{M}^{-1} als Vor– und Nachglättung kombiniert, so dass sich für die GGB–Iterationsmatrix

$$\mathbf{G}_{GGB} = (\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}) \left(\mathbf{I} - \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{\Phi}^T\mathbf{A}\boldsymbol{\Phi})^{-1}\boldsymbol{\Phi}^T\mathbf{A} \right) (\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}) \quad (6.96)$$

ergibt. Das Eigenwertproblem Gl. (6.95) ist im Allgemeinen unsymmetrisch, groß und dünnbesetzt. Es wird bei Waisman et al. mit einem iterativen TFQMR–Eigenwertlöser (Freund et al. (1993)) daher nur für die Eigenwerte $|\lambda_i| > 1$ gelöst. Man beachte, dass die Matrix \mathbf{G} nicht explizit gebildet werden kann, wenn \mathbf{M}^{-1} eine Multigrid–Vorkonditionierung darstellt. In der TFQMR–Eigenwertlösung benötigt man jedoch lediglich die Anwendung von \mathbf{G} auf einen Iterationsvektor.

Bei den hier betrachteten positiv–definiten und symmetrischen Problemen sind alle Eigenwerte der Iterationsmatrix \mathbf{G} kleiner als Eins und eine Eigenwertanalyse Gl. (6.95) liefert schnell konvergente Moden (nahe bei Null liegende Eigenwerte) und langsam konvergente Moden (nahe bei Eins liegende Eigenwerte). Die langsam konvergenten Moden der nahe bei Eins liegenden Eigenwerte von \mathbf{G} sind demnach diejenigen, die von \mathbf{M}^{-1} nur unzureichend erfasst werden. Zur Beschleunigung der Konvergenz solcher Moden lässt sich dann, wie beschrieben, eine GGB–Groblevelkorrektur einführen.

7 Schalenkontakt bei großen Deformationen

*'(...) contact and frictional problems are difficult to solve
since they are highly nonlinear and unsmooth,
and the machinations to treat them are not always aesthetically pleasing.'*
T.A. Laursen in: 'Computational Contact and Impact Mechanics', Springer Verlag

7.1 Kontaktrandbedingungen

In vielen dynamischen Systemen kommt es vor, dass ein Körper die Oberfläche eines weiteren Körpers berührt (Zweikörperkontakt) oder sich so verformt, dass Teile eines Körpers sich berühren (Selbstkontakt). Speziell bei der Modellierung und Simulation von Problemen mit großen Deformationen ist die Berücksichtigung des (Selbst-)Kontakts häufig von großer Bedeutung, wie zum Beispiel in Crashsimulationen oder in der Umformtechnik.

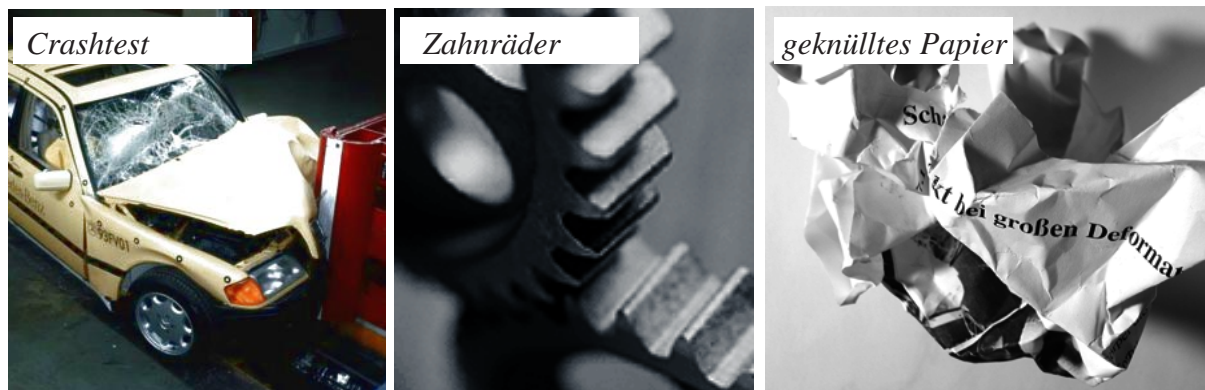


Abb. 7.1: Beispiele für (Selbst-)Kontaktprobleme
Unabhängig von der Annahme großer oder lediglich infinitesimal kleiner Deformationen sind Kontaktprobleme ihrer Natur nach nichtlineare Phänomene. Dies ist auf die mit dem Kontakt einhergehende Änderung der Randbedingungen zurückzuführen. Wo beispielsweise vor dem Auftreten eines Kontakts Spannungsrandbedingungen Γ_N galten, tritt im Kontaktfall die kinematische Randbedingung Γ_c der Inpenetrabilität sowie etwaiges Auftreten von Reibkräften ein (Abb. 7.2).

Kontakt beinhaltet demnach die Ermittlung einer ursprünglich unbekanntes Kontaktfläche Γ_c , die Verhinderung der Überlappung der kontaktierenden Körper durch geeignete kinematische Zwangsbedingungen sowie die Berücksichtigung der Kontaktdruckspannungen sowie eventuell auftretender Reibspannung im (dynamischen) Gleichgewicht des Systems.

Aus mathematischer Sicht stellt Kontakt eine variationelle Ungleichheitsnebenbedingung dar, bei der der Lösungsraum als auch der Raum der Testfunktionen durch die Kontaktrandbedingung (die wiederum von der Lösung abhängt) beschränkt wird (Kikuchi und Oden (1988)). Die besonderen Schwierigkeiten der Behandlung solcher Randbedingungen im Vergleich zu einfachen Neumann- oder Dirichlet-Randbedingungen werden im Laufe dieses Kapitels deutlich.

Es ist nicht Ziel dieser Arbeit den Stand der Forschung bei der Kontaktformulierung umfassend wiederzugeben. Vielmehr soll hier einer der wesentlichen Vorteile der dreidimensionalen Schalenformulierung aus Kap. 2.2 angewandt werden, der darin besteht, dass trotz einer mittelflächenorientierten Beschreibung des Schalenkörpers aufgrund der in der Schalenkinematik enthaltenen Dickenänderung solch komplexe Randbedingungen wie Kontakt für die Schalenoberflächen problemlos und effizient modelliert werden können – eine Möglichkeit, die bei klassischen Schalentheorien ohne Dickenänderung nicht gegeben ist.

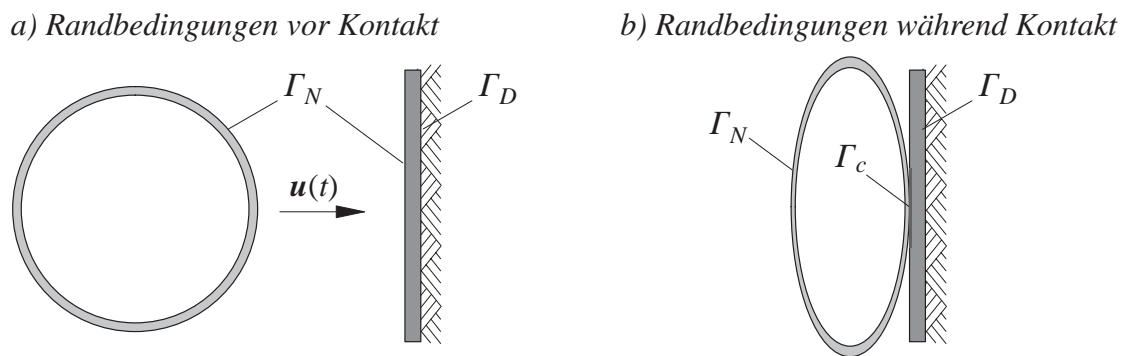


Abb. 7.2: Von der Deformation abhängige Änderung der Randbedingungen bei Kontakt

Ein weiterer Schwerpunkt hier ist die effiziente Gestaltung der Suchalgorithmen für den (Selbst-)Kontakt im Kontext dünnwandiger Strukturen bei großen Deformationen. Auf die Probleme aber auch Vorteile, die sich bei Verwendung der 7-Parameter-Schalenformulierung für diese dünnwandige Strukturen ergeben, wird besonders eingegangen.

Die verwendete (kontinuumsmechanische) Kontaktformulierung folgt in wesentlichen Punkten den Ausführungen für große Deformationen mit Beachtung der Reibung in Laursen (1992) und (2002). Das Besondere des in Laursen (1992) erstmals gegebenen Ansatzes ist, dass nicht nur die (lokale) starke und die schwache Form der Kontaktrandbedingungen für große Deformationen als Kontinuumsformulierung gegeben werden. Auch die Linearisierung der virtuellen Kontaktarbeit erfolgt größtenteils noch im räumlichen Kontinuum. Dieser Umstand erleichtert die Anwendung auf unterschiedliche Typen von Finiten Elementen (wie hier solchen der 7-Parameter-Schalenformulierung) im Rahmen einer impliziten Zeitintegration ungemein.

Anmerkung: Üblicherweise wird die virtuelle Arbeit des Kontakts erst in diskretisierter Form linearisiert (zum Beispiel in Parisch (1989) für eine Diskretisierung mit trilinearen Kontinuumsselementen), was eine Übertragung der resultierenden Ausdrücke auf andere Arten der Diskretisierung erschwert. Ein Vergleich der resultierenden Kontaktsteifigkeitsmatrizen der beiden Ansätze zeigt, dass zumindest unter Verwendung linearer Ansatzfunktionen die Vorgehensweise nach Laursen (1992) in den identischen Ausdrücken mündet wie eine Linearisierung der bereits diskretisierten Arbeitsausdrücke nach Parisch (1989).

7.1.1 Begriffsdefinitionen und Parametrisierung

Abb. 7.3 zeigt schematisch einen Kontakt zweier Körper $\Omega^{[1]}$ und $\Omega^{[2]}$. Der Index in eckigen Klammern $(\cdot)^{[\alpha]}$, $\alpha = 1, 2$ dient der Unterscheidung der Körper und der mit ihnen assoziierten Größen. Weiter sollen die materiellen Punkte von $\Omega^{[1]}$ und $\Omega^{[2]}$ in der Referenzkonfiguration mit \mathbf{x} beziehungsweise \mathbf{y} bezeichnet werden, in der Momentankonfiguration nehmen diese die Positionen $\bar{\mathbf{x}}$ beziehungsweise $\bar{\mathbf{y}}$ ein. Die Bewegungen der Körper von der Referenz- in die Momentankonfiguration zu einem Zeitpunkt t sind:

$$\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \mathbf{u}_t^{[1]} \quad , \quad \bar{\mathbf{y}} = \mathbf{y} + \mathbf{u}_t^{[2]} \quad . \quad (7.1)$$

Mit $\Gamma_c^{[\alpha]}$ wird derjenige Teil vom Rand von $\Omega^{[\alpha]}$ in der Referenzkonfiguration bezeichnet, der alle kontaktierenden Punkte in der Momentankonfiguration einschliesst. Entsprechend der eingeführten Systematik werden die Kontaktränder in der Momentankonfiguration dann $\bar{\Gamma}_c^{[\alpha]}$ genannt. Eine Überlappung von $\Gamma_c^{[\alpha]}$ mit den Dirichlet- und Neumann-Rändern $\Gamma_D^{[\alpha]}$, $\Gamma_N^{[\alpha]}$ wird dabei zu allen Zeitpunkten ausgeschlossen. Um die Kontaktrandbedingungen auch im Falle großer Deformationen objektiv formulieren zu können, ist es praktisch, ein konvektives Koordinatensystems ξ^β , $\beta = 1, 2$ einzuführen, das als fest mit den Kontaktoberflächen verbunden gedacht werden kann (Abb. 7.4).

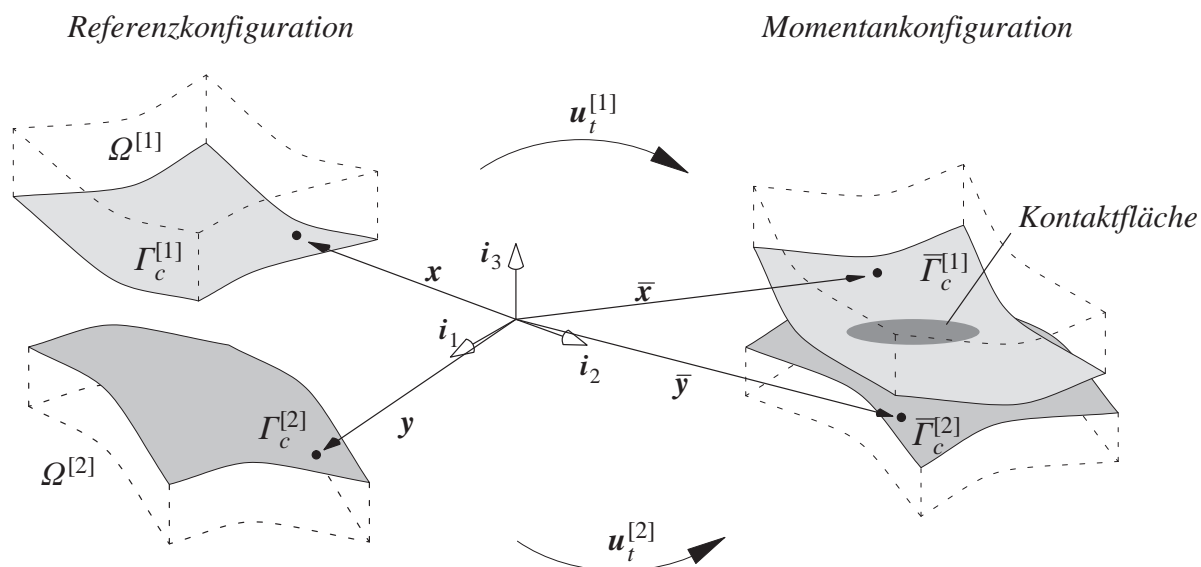


Abb. 7.3: Kontaktproblem

Die Abbildung der Kontaktfläche im Parameterraum $A^{[\alpha]}$ auf $\Gamma_c^{[\alpha]}$ zu einem Zeitpunkt t sei dann:

$$\bar{\Gamma}_c^{[\alpha]} = \boldsymbol{\Psi}_t^{[\alpha]}(A^{[\alpha]}) \quad . \quad (7.2)$$

Die Beschreibung der Lage eines materiellen Punktes $\bar{\mathbf{y}}(\xi^1, \xi^2, t)$ auf der Kontaktfläche kann dann durch

$$\bar{\mathbf{y}} = \boldsymbol{\Psi}_t^{[2]}(\boldsymbol{\xi}) \quad (7.3)$$

erfolgen.

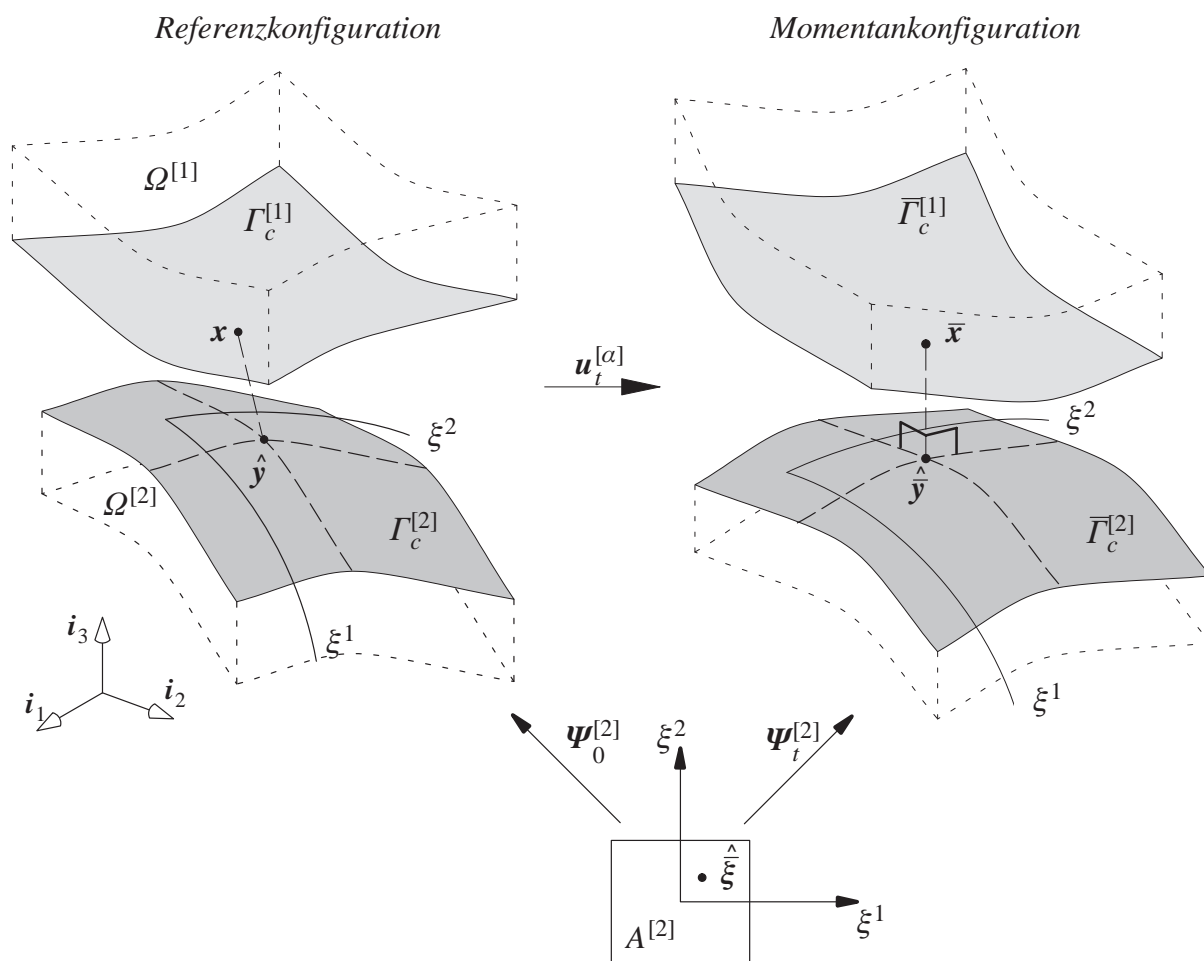


Abb. 7.4: Parametrisierung der Kontaktflächen

7.1.2 Kontaktrandbedingung in Normalenrichtung und Inpenetrabilität

Die Kontaktrandbedingungen können räumlich in solche normal und tangential zur Kontaktfläche aufgespalten werden, wovon in diesem Kapitel zunächst die Bedingungen in Normalenrichtung behandelt werden. Diese gewährleisten die sogenannte *Inpenetrabilität* der kontaktierenden Körper, die besagt, dass zwei Körper sich zur selben Zeit nicht am selben Ort befinden können. Zusätzlich beinhaltet die Normalkontaktrandbedingung, dass zwischen kontaktierenden Oberflächen ausschließlich Druckspannungen übertragen werden. Eine Adhäsion zwischen den kontaktierenden Körpern wird ausgeschlossen. Im folgenden sollen den weit verbreiteten Bezeichnungen in der Literatur (Laursen (2002) und Wriggers (2002)) folgend $\Gamma_c^{[1]}$ als sogenannte *Slave*-, $\Gamma_c^{[2]}$ als *Master*seite des Kontaktproblems bezeichnet werden. Die Normalkontaktrandbedingungen werden dann vollständig in Größen der Slaveseite $\Gamma_c^{[1]}$ ausgedrückt.

Anmerkung: Im Rahmen der Kontinuumsformulierung des Kontaktproblems spielt die Wahl der Master- und Slaveseite keine Rolle und ist jederzeit vertauschbar. Nach der später eingeführten Diskretisierung mittels Finiten Elementen gilt die Vertauschbarkeit jedoch nicht

mehr uneingeschränkt in dem Sinne, dass die Wahl der Slave- und Masterseite die Ergebnisse beeinflussen kann.

Hierzu wird zunächst für jeden Punkt $\mathbf{x} \in \Gamma_c^{[1]}$ der Masterseite ein Projektionspunkt $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t) \in \Gamma_c^{[2]}$ bestimmt, so dass der Abstand zwischen $\bar{\mathbf{x}}$ und $\bar{\mathbf{y}}$ minimal ist:

$$\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t) = \min_{\mathbf{y} \in \Gamma_c^{[2]}} \|\bar{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t) - \bar{\mathbf{y}}(\mathbf{y}, t)\| \quad (7.4)$$

$\hat{\mathbf{y}}$ ist somit eine orthogonale Projektion (closest point projection) von $\bar{\mathbf{x}}$ auf $\bar{\Gamma}_c^{[2]}$ in der Momentankonfiguration (Abb. 7.4 rechts), und $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ ist dessen Lage in der Referenzkonfiguration.

a) kein Kontakt : $g < 0$

b) Kontakt : $g \geq 0$

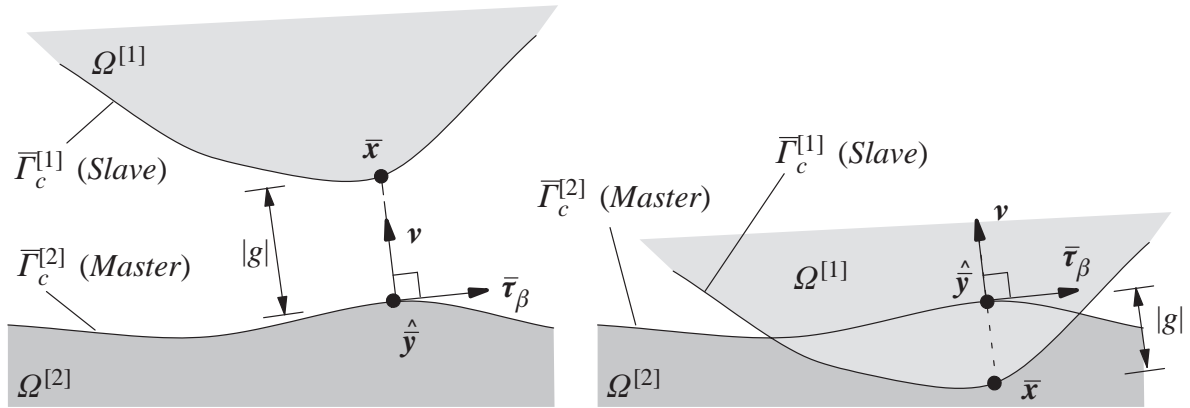


Abb. 7.5: orthogonale Projektion und Klaffung (zweidimensionale Darstellung)

Die sogenannte Klaffungsfunktion oder kurz Klaffung $g(\mathbf{x}, t)$, mit deren Hilfe die Geometrie der Normalkontakttrandbedingung beschrieben wird, lautet dann

$$g(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{v} \cdot (\bar{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t) - \hat{\mathbf{y}}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t), t)) \quad (7.5)$$

mit \mathbf{v} als auswärtsgerichtete normierte Normale auf $\bar{\Gamma}_c^{[2]}$ in $\hat{\mathbf{y}}$.

Die orthogonale Projektion Gl. (7.4) sowie die Klaffung Gl. (7.5) sind in Abb. 7.5 an einem zweidimensionalen Schnitt dargestellt. Die Klaffung $g(\mathbf{x}, t)$ ist nach Gl. (7.5) ein vorzeichenbehaftetes Skalar. Für eine negative Klaffung liegt kein Kontakt vor (Abb. 7.5a), für eine positive Klaffung eine (unzulässige) Penetration der beiden Körper (Abb. 7.5b). Die kinematische Normalkontakttrandbedingung kann daher als Ungleichheitsnebenbedingung

$$g(\mathbf{x}, t) \leq 0 \quad (7.6)$$

formuliert werden.

7.1.3 Normalkontaktkraft

Die zur geometrischen Ungleichheitsnebenbedingung der Klaffung Gl. (7.6) komplementäre Größe ist die Kontaktkraft im Punkt $\mathbf{x} \in \Gamma_c^{[1]}$:

$$\mathbf{t}^{[1]} = \mathbf{P}^{[1]}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}_0(\mathbf{x}), \quad (7.7)$$

mit \mathbf{P} als Erstem Piola–Kirchhoff–Spannungstensor und $\mathbf{n}_0(\mathbf{x})$ als auswärtsgerichtete Normale in \mathbf{x} in der Referenzkonfiguration. Diese wird in Komponenten aufgespalten

$$\mathbf{t}^{[1]} = t_N \mathbf{v} - \mathbf{t}_T, \quad (7.8)$$

so dass t_N den Kontaktdruck in Richtung der Normalen \mathbf{v} des Projektionspunktes $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ in der Momentankonfiguration und \mathbf{t}_T eine Projektion auf die tangentielle Ebene an $\bar{\Gamma}_c^{[2]}$ in $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ darstellt (Abb. 7.6).

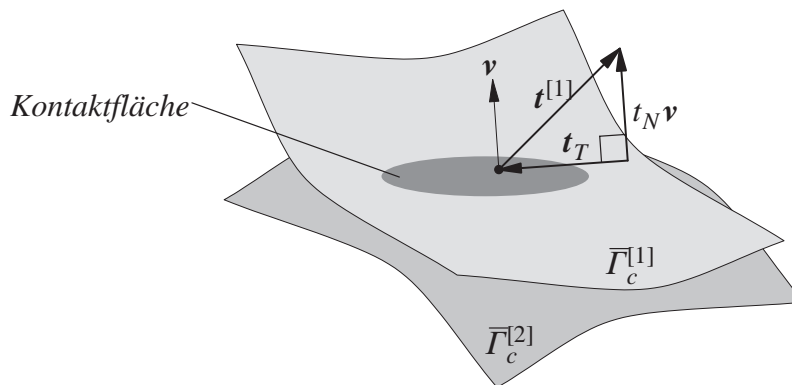


Abb. 7.6: Aufteilung der Kontaktkraft in Normalen- und Tangentialrichtung
Da \mathbf{v} als auswärtsgerichtete Normale auf $\bar{\Gamma}_c^{[2]}$ definiert wurde, hat t_N als Druckkraft positives Vorzeichen.

Anmerkung: Der Aufspaltung Gl. (7.8) liegt die Annahme zugrunde, dass wenn die zwei Oberflächen $\bar{\Gamma}_c^{[1]}$ und $\bar{\Gamma}_c^{[2]}$ sich im Punkt $\bar{\mathbf{x}}$ in Kontakt befinden, die Normale auf $\bar{\Gamma}_c^{[1]}$ dem negativen der Normalen \mathbf{v} auf $\bar{\Gamma}_c^{[2]}$ entspricht.

7.1.4 Kuhn–Tucker–Bedingungen des Normalkontakts

Mit der Definition der Klaffung Gl. (7.6) und der Aufteilung der Kontaktkräfte Gl. (7.8) lassen sich die sogenannten *Kuhn–Tucker Bedingungen* für die Ungleichheitsnebenbedingung des Normalkontakts angeben:

$$g(\mathbf{x}, t) \leq 0 \quad (7.9)_1$$

$$t_N \geq 0 \quad (7.9)_2$$

$$t_N g(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (7.9)_3$$

Gl. (7.9)₁ stellt die geometrische Inpenetrabilitätsbedingung dar, Gl. (7.9)₂ die Bedingung, dass nur Drucknormalkontaktkräfte auftreten können und Gl. (7.9)₃ die Bedingung, dass die Normalkontaktkräfte von Null verschieden sind, wenn und nur wenn Kontakt herrscht, dass heisst die Klaffung zu Null wird. Die Kuhn–Tucker Bedingungen sind in Abb. 7.7 graphisch als Beziehung zwischen der Klaffung g und der Normalkontaktkraft t_N dargestellt.

Für die mathematische Formulierung ist dabei von besonderer Schwierigkeit, dass die Bezie-

hung Abb. 7.7 im Kontaktfall $g = 0$ mehrdeutig, unstetig und daher nicht differenzierbar ist. Es wird daher eine Regularisierung benötigt, auf die in Kap. 7.3 nach der Einführung der schwachen Form der Kontaktrandbedingung eingegangen wird.

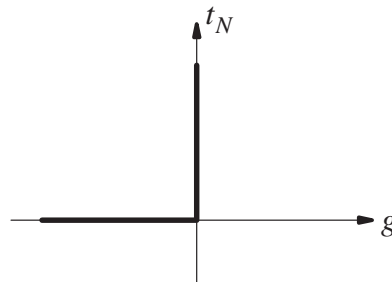


Abb. 7.7: graphische Darstellung der Kuhn–Tucker Bedingungen des Normalkontakts

7.1.5 Kontaktrandbedingung in Tangentialrichtung

Die in Kap. 7.1.1 eingeführte Parametrisierung der Kontaktoberflächen und die orthogonale Projektion Gl. (7.4) werden in gleicher Weise für die Beschreibung der Kinematik für reibungsbehafteten Kontakt verwendet. Dabei wird in dieser Arbeit nur die verhältnismäßig einfache *Coulombsche Reibung* betrachtet, wobei die Formulierung leicht auf andere Reibgesetze (Wriggers (2002)) übertragen werden kann.

Um die Bewegung eines Punktes $\mathbf{x} \in \Gamma_c^{[1]}$ über die Oberfläche $\Gamma_c^{[2]}$ zu beschreiben, werden Basisvektoren

$$\boldsymbol{\tau}_\beta = \boldsymbol{\Psi}_{0,\beta}^{[2]}(\hat{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}, t)) = \hat{\mathbf{y}}_{,\beta} \quad , \quad \bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta = \boldsymbol{\Psi}_{t,\beta}^{[2]}(\hat{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}, t)) = \hat{\bar{\mathbf{y}}}_{,\beta} \quad , \quad \beta = 1, 2 \quad (7.10)$$

in der Referenz- und Momentankonfiguration eingeführt (Abb. 7.8). Diese sind jedoch nicht fest mit der Oberfläche $\Gamma_c^{[2]}$ verbunden, sondern stellen die Basisvektoren im Projektionspunkt $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ beziehungsweise $\hat{\bar{\mathbf{y}}}(\mathbf{x}, t)$ dar. Wenn der Punkt \mathbf{x} sich bewegt, 'gleiten' sie somit wie sein 'Schatten' über die Oberfläche $\Gamma_c^{[2]}$, selbst wenn der Körper $\Omega^{[2]}$ mit Oberfläche $\Gamma_c^{[2]}$ unbewegt bleibt. Dadurch, dass die Basisvektoren $\boldsymbol{\tau}_\beta(\hat{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}, t))$ mit einem bestimmten materiellen Punkt \mathbf{x} assoziiert sind und sich durch dessen orthogonale Projektion $\hat{\mathbf{y}}$ in der Momentankonfiguration ergeben, variieren sie sowohl infolge einer Deformation des Slavekörpers $\Omega^{[2]}$ als auch infolge einer relativen Bewegung der Projektion $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ von \mathbf{x} infolge der Verschiebungen von \mathbf{x} .

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels 7 gilt die Summation über gleiche Indizes, wobei griechische Indizes α, β, γ die Werte 1 und 2 annehmen.

Der zu den Basisvektoren $\boldsymbol{\tau}_\beta(\hat{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}, t))$ zugehörige Einheitstensor (Metrik) im Koordinatensystem ξ^i ist in seiner ko- und kontravarianten Darstellung:

$$\boldsymbol{\tau} = \tau_{\alpha\beta} \boldsymbol{\tau}^\alpha \otimes \boldsymbol{\tau}^\beta = \tau^{\alpha\beta} \boldsymbol{\tau}_\alpha \otimes \boldsymbol{\tau}_\beta \quad , \quad \tau_{\alpha\beta} = \boldsymbol{\tau}_\alpha \cdot \boldsymbol{\tau}_\beta \quad , \quad \tau^{\alpha\beta} = \boldsymbol{\tau}^\alpha \cdot \boldsymbol{\tau}^\beta \quad . \quad (7.11)$$

Analog ergibt sich die Metrik $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ aus den Basisvektoren $\bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta$ beziehungsweise $\bar{\boldsymbol{\tau}}^\beta$ in der Momentankonfiguration. Die für die Ermittlung der Reibkräfte maßgebliche kinematische Größe ist die

relative Geschwindigkeit zwischen dem Punkt \mathbf{x} und seiner Projektion $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ auf $\Gamma_c^{[2]}$. Um diese zu ermitteln, wird die Zeitableitung des relativen Ortsvektors zwischen $\bar{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t)$ und seiner Projektion $\hat{\bar{\mathbf{y}}}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t), t)$ benötigt. Es wird dazu vorausgesetzt, dass der Kontakt während des Reibvorganges erhalten bleibt, die Klaffung g sich also nicht verändert. Für die Klaffungsrate gilt demnach

$$\dot{g} \equiv 0, \quad (7.12)$$

und die relative Geschwindigkeit folgt aus Gl. (7.12) mit Gl. (7.5):

$$\frac{d}{dt} [\bar{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t) - \hat{\bar{\mathbf{y}}}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t), t)] = \mathbf{0}. \quad (7.13)$$

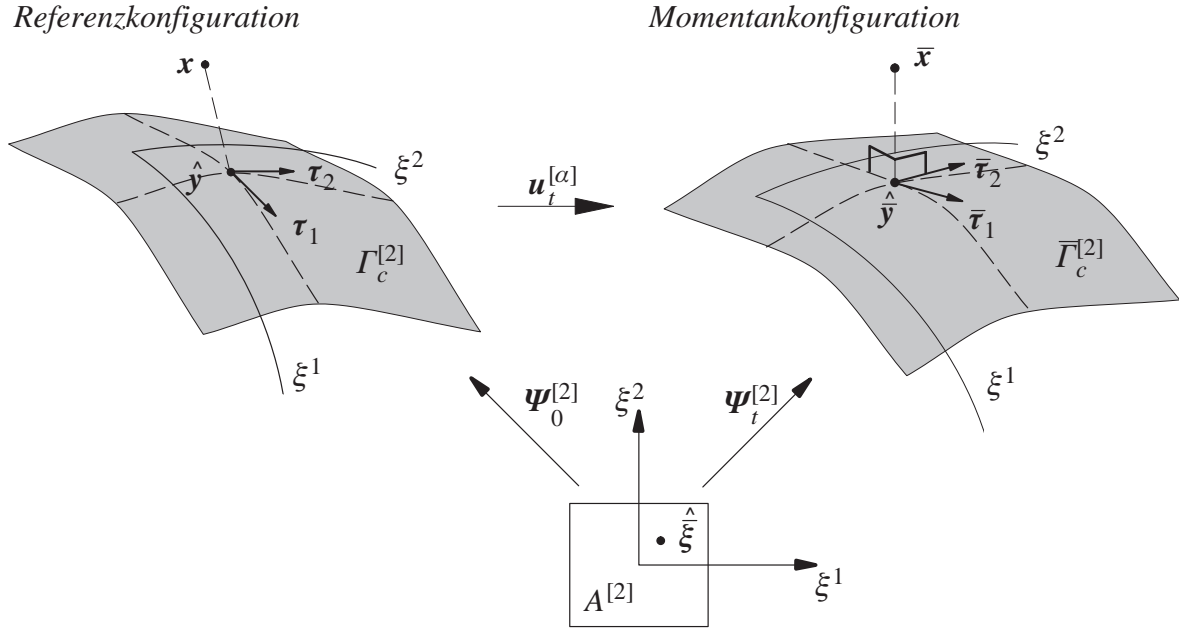


Abb. 7.8: konvektive Basisvektoren im Projektionspunkt
Mit Hilfe der Kettenregel erhält man:

$$\dot{\mathbf{u}}^{[1]}(\mathbf{x}, t) - \underbrace{\frac{\partial \hat{\bar{\mathbf{y}}}(\hat{\mathbf{y}}, t)}{\partial t}}_{\dot{\mathbf{u}}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t), t)} - \underbrace{\frac{\partial \hat{\bar{\mathbf{y}}}(\hat{\mathbf{y}}, t)}{\partial \hat{\mathbf{y}}}}_{\mathbf{F}_t^{[2]}} \frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{0} \quad (7.14)$$

$$\Rightarrow \dot{\mathbf{u}}^{[1]}(\mathbf{x}, t) - \dot{\mathbf{u}}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t), t) = \mathbf{F}_t^{[2]} \frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)).$$

Die Relativgeschwindigkeit Gl. (7.14) wird mit Hilfe der konvektiven Basisvektoren als konvektive Relativgeschwindigkeit in der Referenzkonfiguration ausgedrückt:

$$\mathbf{v}_T = \frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)) = \dot{\xi}^\beta(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\tau}_\beta. \quad (7.15)$$

Mit $\bar{\boldsymbol{\tau}}_i = \mathbf{F}_t^{[2]} \boldsymbol{\tau}_i$ ergibt sich die Relativgeschwindigkeit in der Momentankonfiguration zu:

$$\bar{\mathbf{v}}_T = \mathbf{F}_t^{[2]} \frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)) = \dot{\xi}^\beta(\mathbf{x}, t) \bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta. \quad (7.16)$$

7.1.6 Tangentialkontaktkraft

Mit der in Gl. (7.8) bereits eingeführten Aufteilung der Kontaktkraft in eine normale und eine tangentielle Komponente wird nun die tangentielle Kontaktkraft (Reibkraft)

$$\mathbf{t}_T(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{t}^{[1]}(\mathbf{x}, t) + t_N \mathbf{v} \quad (7.17)$$

komponentenweise in den konvektiven ko- und kontravarianten Basisvektoren der Momentan-
konfiguration ausgedrückt:

$$\mathbf{t}_T(\mathbf{x}, t) = t_{T\beta} \bar{\mathbf{v}}^\beta = t_T^\beta \bar{\mathbf{v}}_\beta . \quad (7.18)$$

Mit der Relativgeschwindigkeit und der Reibkraft in der Darstellung im konvektiven Koordinaten-
system sind alle Größen gegeben, um das Coulombsche Reibgesetz aufstellen zu können.

7.1.7 Coulombsche Reibung

Die Coulombsche Reibung wird mit Hilfe der Relativgeschwindigkeit $\bar{\mathbf{v}}_T$ (Gl. (7.16)), der Reib-
kraft \mathbf{t}_T (Gl. (7.18)) sowie des Reibungskoeffizienten μ , der die Rauheit der Oberflächenpaarung
charakterisiert (Reibungskoeffizienten für einige Materialpaarungen finden sich beispielsweise
in Wriggers (2002)), und der Normalkontaktkraft t_N aufgestellt, für die wiederum die Kuhn-
Tucker-Bedingungen Gl. (7.9) gelten:

$$\Phi(\mathbf{t}_T, t_N) = \|\mathbf{t}_T\| - \mu t_N \leq 0 \quad (7.19)_1$$

$$\mathbf{v}_T = \dot{\gamma} \frac{\mathbf{t}_T}{\|\mathbf{t}_T\|} \quad , \quad \dot{\gamma} \geq 0 \quad (7.19)_2$$

$$\dot{\gamma} \Phi = 0 \quad (7.19)_3$$

Gl. (7.19)₁ besagt, dass der Betrag der tangentiellen Reibkräfte stets kleiner sein muss als die mit
dem Reibungskoeffizienten multiplizierte Normalkontaktkraft. Die zweite Bedingung Gl.
(7.19)₂ bedeutet, dass die Relativgeschwindigkeit entgegen der Reibkraft gerichtet ist oder den
Wert Null annimmt, wenn keine Reibkraft auftritt. Die dritte Bedingung Gl. (7.19)₃ ist eine Kon-
tinuitätsbedingung, die besagt, dass Gleiten nur auftritt, wenn $\|\mathbf{t}_T\| = \mu t_N$ gilt, der Betrag der
Reibkraft also die Grenze zwischen Haftreibung und Gleitreibung erreicht.

Anmerkung: Es existiert eine in Abb. 7.9 erkennbare Analogie zwischen der Coulombschen Reibung
und einem nicht-assozierten Plastizitätsgesetz mit ideal starr-plastischem Material-
verhalten. Das Coulombsche Gesetz Gl. (7.19)₁ entspricht dabei einer Fließfläche mit
 μt_N als Fließspannung, Gl. (7.19)₂ entspricht der Fließregel mit $\dot{\gamma}$ als sogenanntem pla-
stischen Multiplikator, und Gl. (7.19)₃ stellt eine Konsistenzbedingung dar. Diese Analo-
gie wird bei der algorithmischen Umsetzung des Rückprojektionsalgorithmus für die
Reibkräfte und der zeitlichen Diskretisierung der Gleitgeschwindigkeit noch ausgenutzt
werden.

Analog zu den Kuhn-Tucker-Bedingungen des Normalkontakts wird für die Coulombsche Rei-
bung eine graphische Interpretation in Abb. 7.9 gegeben.

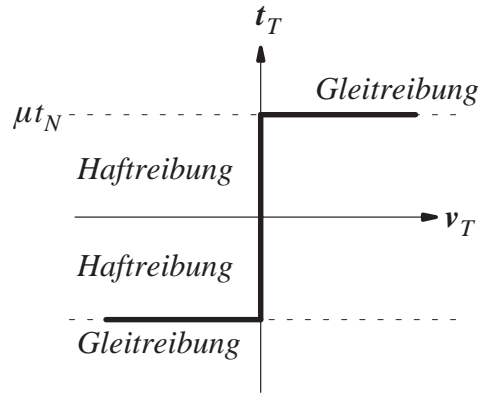


Abb. 7.9: Coulombsche Reibung – eindimensionale Darstellung

Wie bei den Normalkontaktbedingungen Gl. (7.9) tritt auch hier die Schwierigkeit der Unstetigkeit und Mehrdeutigkeit in der Beziehung zwischen Reibkraft und Relativgeschwindigkeit auf, auf die in Kap. 7.3 näher eingegangen wird.

Mit Hilfe von Gl. (7.16) und Gl. (7.18)

$$\bar{v}_T = \hat{\xi}^\beta \bar{\tau}_\beta = \hat{\xi}^\alpha \bar{\tau}_{\alpha\beta} \bar{\tau}^\beta \quad , \quad t_T = t_{T\alpha} \bar{\tau}^\alpha = t_{T\alpha} \bar{\tau}^{\alpha\beta} \bar{\tau}_\beta \quad (7.20)$$

lassen sich die Gleichungen (7.19) der Coulombschen Reibung komponentenweise im konvektiven Koordinatensystem ξ^i angeben:

$$\Phi(t_T, t_N) = \left(t_{T\alpha} \bar{\tau}^{\alpha\beta} t_{T\beta} \right)^{\frac{1}{2}} - \mu t_N \leq 0 \quad , \quad (7.21)_1$$

$$\bar{\tau}_{\alpha\beta} \hat{\xi}^\beta = \dot{\gamma} \frac{t_{T\alpha}}{\left(t_{T\beta} \bar{\tau}^{\beta\gamma} t_{T\gamma} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad , \quad \dot{\gamma} \geq 0 \quad , \quad (7.21)_2$$

$$\dot{\gamma} \Phi = 0 \quad . \quad (7.21)_3$$

7.2 Schwache Form der Kontaktrandbedingungen

Für die Umsetzung mit Finiten Elementen werden die gegebenen, punktweise zu erfüllenden Kontaktbedingungen nun mittels eines Galerkin-Ansatzes in eine variationelle Formulierung eingebracht. Da es sich sowohl beim Normal- als auch beim tangentiellen Kontakt um nichtlineare Beziehungen handelt, wird anschließend eine Linearisierung der virtuellen Arbeit des Kontakts vorgenommen, die eine iterative Lösung mit einer Newton-Iteration im Rahmen eines Zeitintegrationsalgorithmus (Kap. 2) erlaubt.

Das Besondere des hier verfolgten und erstmals von Laursen (1992) vorgestellten Vorgehens gegenüber früheren Kontaktformulierungen für große Deformationen (Wriggers und Simo (1985), Parisch (1989), Wriggers et al. (1990)) ist, dass die Linearisierung beinahe vollständig im Rahmen der Kontinuumsformulierung gegeben wird, bevor eine räumliche Diskretisierung mit zwei- oder dreidimensionalen Finiten Elementen eines bestimmten Typs durchgeführt wird.

Dies ermöglicht die einfache Anwendung der Formulierung auf beliebige Arten von Diskretisierungen, so auch auf die hier betrachtete 7-Parameter-Schalenformulierung.

7.2.1 Virtuelle Arbeit des Kontakts

Ausgangspunkt ist die Variation des modifizierten Funktionals von Hu–Washizu Gl. (2.47), dem ein Term für die virtuelle Arbeit der Kontaktkräfte an den Kontaktflächen $\Gamma_c^{[1]}$ und $\Gamma_c^{[2]}$ hinzugefügt wird:

$$\delta\Pi_{HW}^{\text{mod}} + \delta\Pi_c^{[1]} + \delta\Pi_c^{[2]} = \delta\Pi_{HW}^{\text{mod}} - \sum_{\alpha=1}^2 \int_{\Gamma_c^{[\alpha]}} \mathbf{t}^{[\alpha]} \cdot \delta\mathbf{u}^{[\alpha]} d\Gamma_c = 0 . \quad (7.22)$$

Erzwingt man punktweise das Gleichgewicht für die Kontaktspannungen der kontaktierenden Oberflächen

$$\mathbf{t}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})) d\Gamma^{[2]} = - \mathbf{t}^{[1]}(\mathbf{x}) d\Gamma^{[1]} , \quad (7.23)$$

so lassen sich die beiden Integrale in Gl. (7.22) zu einem einzigen über eine Fläche zusammenfassen:

$$\delta\Pi_c(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) = - \int_{\Gamma_c^{[1]}} \mathbf{t}^{[1]} \cdot \left(\delta\mathbf{u}^{[1]}(\mathbf{x}) - \delta\mathbf{u}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})) \right) d\Gamma . \quad (7.24)$$

Gl. (7.24) lässt sich nun durch eine Variation der im vorigen Kapitel 7.1 eingeführten kinematischen Kontaktgrößen der Klaffung g und des Projektionspunktes im Parameterraum $\hat{\xi}$ ausdrücken. Dabei wird von der Gateaux–Ableitung

$$\delta(\cdot)(\mathbf{u}_t) = \left. \frac{d}{d\eta} \right|_{\eta=0} [(\cdot)(\mathbf{u}_t + \eta\delta\mathbf{u})] \quad (7.25)$$

Gebrauch gemacht.

Die Variation δg der Klaffung ergibt sich aus Gl. (7.5) ohne Angabe der Herleitung zu

$$\delta g = - \mathbf{v} \cdot \left(\delta\mathbf{u}^{[1]}(\mathbf{x}) - \delta\mathbf{u}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})) \right) . \quad (7.26)$$

Für $\delta\hat{\xi}$ erfolgt eine Variation der orthogonalen Projektion Gl. (7.4), aus der sich der Projektionspunkt $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ ergibt. Die orthogonale Projektion beinhaltet, dass die auswärtsgerichtete Normale \mathbf{v} normal zu den kovarianten Basisvektoren $\bar{\boldsymbol{\tau}}_\alpha$ im Projektionspunkt $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t)$ sein muss (Abb. 7.5):

$$\left(\bar{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) - \hat{\mathbf{y}}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})) \right) \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_\alpha = 0 . \quad (7.27)$$

Die Variation von Gl. (7.27) ergibt

$$\left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} + g \kappa_{\alpha\beta} \right) \delta\hat{\xi}^\beta = \left(\delta\mathbf{u}^{[1]}(\mathbf{x}) - \delta\mathbf{u}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})) \right) \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_\alpha - g \mathbf{v} \cdot \delta\mathbf{u}^{[2],\alpha}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})) , \quad (7.28)$$

mit $\kappa_{\alpha\beta} = \boldsymbol{\nu} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha,\beta}$ als Krümmung der Kontaktfläche $\bar{\Gamma}_c^{[2]}$ im Punkt $\hat{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{x}, t)$. Bei genauer Erfüllung der Inpenetrabilitätsbedingung $g = 0$ vereinfacht sich dieser Ausdruck zu:

$$\delta \hat{\xi}^\beta = \bar{\boldsymbol{\tau}}^\beta \cdot \left(\delta \boldsymbol{u}^{[1]}(\boldsymbol{x}) - \delta \boldsymbol{u}^{[2]}(\hat{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{x})) \right). \quad (7.29)$$

Für eine ausführliche Herleitung hiervon sei auf Laursen (2002) verwiesen. Mit Hilfe der Ausdrücke für δg und $\delta \hat{\xi}$ und einer Aufteilung der virtuellen Kontaktarbeit Gl. (7.24) in Komponenten normal und tangential zur Kontaktfläche folgt:

$$\delta \Pi_c(\boldsymbol{u}, \delta \boldsymbol{u}) = - \int_{\Gamma_c^{[1]}} (t_N \boldsymbol{\nu} - t_{T\alpha} \bar{\boldsymbol{\tau}}^\alpha) \left(\delta \boldsymbol{u}^{(1)}(\boldsymbol{x}) - \delta \boldsymbol{u}^{[2]}(\hat{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{x})) \right) d\Gamma = \int_{\Gamma_c^{[1]}} t_N \delta g + t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^\alpha d\Gamma. \quad (7.30)$$

In Gl. (7.30) wurde von der Bedingung $g = 0$ und daher von Gl. (7.29) Gebrauch gemacht. In der algorithmischen Umsetzung wird die exakte Erfüllung der Inpenetrabilitätsbedingung durch eine – noch nicht eingeführte – Regularisierung der Kuhn–Tucker Bedingungen jedoch verletzt; es wird daher hier angenommen, dass diese Verletzung ausreichend klein sei.

7.3 Regularisierung der Kontaktrandbedingungen

Da die Kuhn–Tucker–Bedingungen für den Normalkontakt Gl. (7.9) und das Coulombsche Reibgesetz Gl. (7.19) mehrdeutig und nicht differenzierbar sind, muss eine Form der Regularisierung eingebracht werden, bevor eine Linearisierung von Gl. (7.30) vorgenommen werden kann.

Für eine solche Regularisierung sind in der Literatur im wesentlichen drei Techniken bekannt. Sie kann über die Einführung von 'Straftermen' in Gl. (7.30) für die Verletzung der Ungleichheitsnebenbedingungen erfolgen (die sogenannte *Penalty–Methode*), über die Einführung von Lagrange–Multiplikatoren für die Normal– und Tangentialkräfte (Wriggers (2002)) oder mittels Augmented Lagrange–Multiplikatoren (Augmented Lagrange multipliers).

Hier wird eine Regularisierung mittels *Augmented–Lagrange–Multiplikatoren* verwendet. Um diese zu erläutern, muss jedoch zunächst die Penalty–Methode betrachtet werden, da sie innerhalb der Augmented–Lagrange–Formulierung verwendet wird.

7.3.1 Penalty–Regularisierung

In der Penalty–Formulierung werden im Ausdruck für die virtuelle Arbeit des Kontakts

$$\delta \Pi_c(\boldsymbol{u}, \delta \boldsymbol{u}) = \int_{\Gamma_c^{[1]}} t_N \delta g + t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^\alpha d\Gamma \quad (7.31)$$

Verletzungen der Ungleichheitsnebenbedingungen Gl. (7.9) und (7.19) mit Straftermen belegt. Es wird zunächst der Normalkontakt und dessen Inpenetrabilitätsbedingung betrachtet. Die In-

penetrabilitätsbedingung besagt, dass die Klaffung in der Definition Gl. (7.5) nicht positiv werden darf:

$$g(\mathbf{x}, t) \leq 0 . \quad (7.32)$$

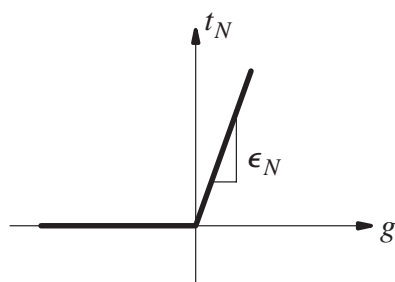
Für den Fall positiver Klaffung (Überlappung der Körper) wird die Normalkontaktkraft zu

$$t_N = \epsilon_N \langle g \rangle \quad (7.33)$$

gewählt. $\langle \cdot \rangle$ ist hierin die sogenannte Macauley–Klammer, die den Wert ihres Operanden liefert, wenn dieser positiv ist und sonst Null ergibt, und ϵ_N ist der sogenannte Penalty–Parameter.

Diese Wahl für t_N führt zu der in Abb. 7.10a) dargestellten Beziehung zwischen der Normalkontaktkraft und der Klaffung. Sie ist eindeutig aber nach wie vor an der Stelle $g = 0$ unstetig. Man kann erkennen, dass die penalty–regularisierte Normalkontakt–Klaffungs–Beziehung bei $\epsilon_N \rightarrow +\infty$ gegen die exakte Beziehung Abb. 7.7 strebt. Die Unstetigkeit im Ursprung $g = 0$ spielt in der algorithmischen Umsetzung keine Rolle, da dieser Punkt nie genau erzielt wird.

a) Normalkontakt



b) Coulombsche Reibung

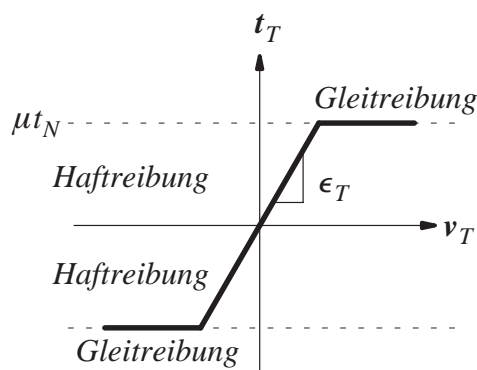


Abb. 7.10: Penalty Regularisierung der Ungleichheitsnebenbedingungen des Kontakts
Nachteilig an der Penalty–Formulierung ist die fehlende Motivation für die Wahl des Penalty–Parameters. Eine hoher Penalty–Parameter führt zu geringeren Überlappungen, jedoch auch zu einer schlechteren Konditionierung der resultierenden Kontaktsteifigkeitsmatrizen.

Für die Coulombsche Reibung, die in Gl. (7.19) in Ratenform formuliert ist, bietet es sich an, die Penalty–Regularisierung mittels einer Reibkrafttrate und eines tangentiellen Penalty–Parameters ϵ_T einzubringen:

$$t_N = \epsilon_N \langle g \rangle ,$$

$$\Phi(t_T, t_N) = \left(t_{T\alpha} \bar{\tau}^{\alpha\beta} t_{T\beta} \right)^{\frac{1}{2}} - \mu t_N \leq 0 , \quad (7.34)$$

$$\dot{t}_t^{\alpha} = \epsilon_T \left[\bar{\tau}_{\alpha\beta} \hat{\xi}^{\beta} - \dot{\gamma} \frac{t_{T\alpha}}{\left(t_{T\beta} \bar{\tau}^{\beta\gamma} t_{T\gamma} \right)^{\frac{1}{2}}} \right] , \quad \dot{\gamma} \geq 0 , \quad \dot{\gamma} \Phi = 0 .$$

Der einzige Unterschied zur nicht-regularisierten Form Gl. (7.19) liegt darin, dass die Differenz zwischen der totalen Gleitrate $\hat{\xi}^\beta$ und der plastischen Gleitrate

$$\bar{\tau}_{\alpha\beta} \hat{\xi}_p^\beta = \dot{\gamma} \frac{t_{T\alpha}}{\left(t_{T\beta} \bar{\tau}^{\beta\gamma} t_{T\gamma} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (7.35)$$

mit dem Penalty-Parameter ϵ_T bestraft wird.

Die Reibkraftrate \dot{t} wird aus Gründen der Objektivität mittels einer Lie-Zeitableitung bezüglich des Geschwindigkeitsfeldes $\dot{\mathbf{u}}^{[2]}$ der Kontaktfläche $\Gamma_c^{[2]}$ bestimmt:

$$\mathcal{L}_{\mathbf{u}^{[2]}} t_T = \dot{t}_{T\alpha} \bar{\tau}^\alpha . \quad (7.36)$$

Für den Beweis der Objektivität sei hier auf Laursen (2002) verwiesen, Details zur Lie-Zeitableitung findet man beispielsweise in Holzapfel (2000). Die regularisierte Form des Reibgesetzes ist in Abb. 7.10b) zweidimensional veranschaulicht. Für $\epsilon_T \rightarrow +\infty$ erhält man wiederum die unregularisierte Form des Coulombschen Reibgesetzes Abb. 7.9. Im Bereich der Haftreibung wird eine (kleine) elastische Deformation zugelassen, wodurch die Beziehung zwischen der Reibkraft und dem Reibweg nun eindeutig ist. Die Analogie zu einem elasto-plastischen Materialverhalten wird deutlich und erlaubt die Anwendung numerischer Integrationsverfahren, wie sie in der elasto-plastischen Materialmodellierung verwendet werden (Giannakopoulos (1989)). Wie beim Normalkontakt besteht der hauptsächliche Nachteil dieses Ansatzes in der willkürlichen Wahl des Penalty-Parameters ϵ_T und der schlechten Konditionierung der resultierenden Steifigkeitsmatrizen für große ϵ_T , beziehungsweise in verhältnismäßig großen elastischen Deformationen im Falle des Haftens bei kleinem ϵ_T .

7.3.2 Augmented-Lagrange-Regularisierung

Bei einer Regularisierung mittels sogenannter Augmented-Lagrange-Multiplikatoren werden für die Normalkontaktkraft t_N und die Reibkräfte $t_{T\alpha}$ unabhängige Variablen λ_N und $\lambda_{T\alpha}$ eingeführt und diese mit der Penalty-Methode aus Kap. 7.3.1 kombiniert:

$$\begin{aligned} \delta\Pi_c(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}, \lambda_N, \lambda_{T\alpha}) &= \int_{\Gamma_c^{[1]}} t_N \delta g + t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^\alpha d\Gamma , \\ t_N &= \langle \lambda_N + \epsilon_{Ng} \rangle , \\ t_{T\alpha} &= \lambda_{T\alpha} + \epsilon_T \bar{\tau}_{\alpha\beta} \left(\hat{\xi}^\beta - \hat{\xi}_p^\beta \right) , \end{aligned} \quad (7.37)$$

mit den bereits in Gl. (7.19) angegebenen Bedingungen für $t_{T\alpha}$

$$\begin{aligned}
\Phi(t_T, t_N) &= \left(t_{T\alpha} \bar{\tau}^{\alpha\beta} t_{T\beta} \right)^{\frac{1}{2}} - \mu t_N \leq 0 , \\
\bar{\tau}_{\alpha\beta} \hat{\xi}_p^\beta &= \dot{\gamma} \frac{t_{T\alpha}}{\left(t_{T\beta} \bar{\tau}^{\beta\gamma} t_{T\gamma} \right)^{\frac{1}{2}}} , \quad \dot{\gamma} \geq 0 , \\
\dot{\gamma} \Phi &= 0 ,
\end{aligned} \tag{7.38}$$

und den Bedingungen für die Lagrange–Multiplikatoren:

$$\begin{aligned}
g &\leq 0 , \\
\lambda_N &\geq 0 , \\
\lambda_N g &= 0 , \\
\Phi(\lambda_T, \lambda_N) &= \left(\lambda_{T\alpha} \bar{\tau}^{\alpha\beta} \lambda_{T\beta} \right)^{\frac{1}{2}} - \mu \lambda_N \leq 0 , \\
\bar{\tau}_{\alpha\beta} \hat{\xi}_p^\beta &= \dot{\gamma}_\lambda \frac{\lambda_{T\alpha}}{\left(\lambda_{T\beta} \bar{\tau}^{\beta\gamma} \lambda_{T\gamma} \right)^{\frac{1}{2}}} , \quad \dot{\gamma}_\lambda \geq 0 , \\
\dot{\gamma}_\lambda \Phi &= 0 .
\end{aligned} \tag{7.39}$$

Die exakte Erfüllung des Coulombschen Reibgesetzes erfordert $\hat{\xi}^\alpha = \hat{\xi}_p^\alpha$, was durch die Lösung von Gl. (7.39) für λ_N, λ_T und $\dot{\gamma}_\lambda$ erzielt wird. In diesem Fall wird der Penalty–Beitrag zu den Kontaktkräften t_N und $t_{T\alpha}$ in Gl. (7.37) zu Null und die Kontaktkräfte entsprechen genau den Lagrange Multiplikatoren. Zur Ermittlung der Lagrange–Multiplikatoren wird ein Iterations–schema verwendet, auf dass in Kap. 7.8 nach der Diskretisierung detaillierter eingegangen wird. Dabei werden in einem iterativen Prozess die Lagrange–Multiplikatoren mit Hilfe des Penalty–Beitrags zu den Kontaktkräften in Gl. (7.37) aktualisiert.

7.4 Linearisierung

Für die Einbettung der Kontaktformulierung in die implizite Zeitintegration aus Kap. 2.3 müssen die Kontaktintegrale in der schwachen (und regularisierten) Form linearisiert werden. Mit k als Iterationszähler einer Newton–Iteration lautet die linearisierte virtuelle Kontaktarbeit:

$$\begin{aligned}
\text{LIN } \delta\Pi_c(\mathbf{u}_t^k, \delta\mathbf{u}) &= \delta\Pi_c(\mathbf{u}_t^k, \delta\mathbf{u}) + \Delta\delta\Pi_c(\mathbf{u}_t^k, \delta\mathbf{u}) , \\
\Delta\delta\Pi_c(\mathbf{u}_t^k, \delta\mathbf{u}) &= \left. \frac{d}{d\eta} \right|_{\eta=0} \delta\Pi_c(\mathbf{u}_t^k + \eta\Delta\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) , \\
\mathbf{u}_t^{k+1} &= \mathbf{u}_t^k + \Delta\mathbf{u} .
\end{aligned} \tag{7.40}$$

Da in Gl. (7.30) die Integration über die Kontaktfläche in der Referenzkonfiguration erfolgt,

ist lediglich der Integrand von den Verschiebungen abhängig und führt auf:

$$\Delta \delta \Pi_c(\mathbf{u}_t, \delta \mathbf{u}) = \int_{\Gamma_c^{[1]}} \Delta \left(t_N \delta g + t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^\alpha \right) d\Gamma = \int_{\Gamma_c^{[1]}} \Delta t_N \delta g + t_N \Delta \delta g + t_{T\alpha} \Delta \delta \hat{\xi}^\alpha + \Delta t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^\alpha d\Gamma . \quad (7.41)$$

Für die Linearisierung des Normalkontakts folgt mit δg aus Gl. (7.26), $\delta \hat{\xi}^\alpha$ aus Gl. (7.29) und

$$\begin{aligned} \Delta \hat{\xi}^\beta &= \bar{\boldsymbol{\tau}}^\beta \cdot \left(\Delta \mathbf{u}^{[1]}(\mathbf{x}) - \Delta \mathbf{u}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})) \right) , \\ \Delta g &= -\mathbf{v} \cdot \left(\Delta \mathbf{u}^{[1]}(\mathbf{x}) - \Delta \mathbf{u}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})) \right) \end{aligned} \quad (7.42)$$

nach einer recht beträchtlichen Menge Algebra für $\Delta(t_N \delta g)$:

$$\begin{aligned} \Delta(t_N \delta g) &= \Delta t_N \delta g + t_N \Delta \delta g \\ &= t_N \delta g \Delta g \\ &\quad + t_N g \mathbf{v} \cdot \left(\delta \mathbf{u}_{,\gamma}^{[2]} + \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\gamma,\alpha} \delta \hat{\xi}^\alpha \right) \bar{\boldsymbol{\tau}}^{\beta\gamma} \mathbf{v} \cdot \left(\Delta \mathbf{u}_{,\beta}^{[2]} + \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\beta,\alpha} \Delta \hat{\xi}^\alpha \right) \\ &\quad + t_N \delta \hat{\xi}^\beta \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{u}_{,\beta}^{[2]} + t_N \Delta \hat{\xi}^\beta \mathbf{v} \cdot \delta \mathbf{u}_{,\beta}^{[2]} + t_N \mathbf{v} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\beta,\alpha} \delta \hat{\xi}^\beta \Delta \hat{\xi}^\alpha . \end{aligned} \quad (7.43)$$

t_N resultiert hierin aus der Regularisierung in Kap. 7.3. Eine Herleitung von Gl. (7.43) wird auch in der Originalliteratur (Laursen (1992)) nicht gegeben, sie findet sich jedoch in ausführlicher Form bei Özdemir (2003).

Für den Term $t_{T\alpha} \Delta \delta \hat{\xi}^\alpha$ in Gl. (7.41) ergibt sich $t_{T\alpha}$ aus der Regularisierung Kap. 7.3 und $\Delta \delta \hat{\xi}^\alpha$ implizit aus

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} \Delta \delta \hat{\xi}^\beta &= -\bar{\boldsymbol{\tau}}_\alpha \cdot \delta \mathbf{u}_{,\beta}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) \Delta \hat{\xi}^\beta - \bar{\boldsymbol{\tau}}_\alpha \cdot \Delta \mathbf{u}_{,\beta}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) \delta \hat{\xi}^\beta \\ &\quad - \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_\alpha \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\beta,\gamma} + g \mathbf{v} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha,\beta\gamma} \right) \delta \hat{\xi}^\beta \Delta \hat{\xi}^\alpha \\ &\quad - \delta \hat{\xi}^\beta \bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta \cdot \left(\Delta \mathbf{u}_{,\alpha}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) + \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha,\gamma} \Delta \hat{\xi}^\gamma \right) - \Delta \hat{\xi}^\beta \bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta \cdot \left(\delta \mathbf{u}_{,\alpha}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) + \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha,\gamma} \delta \hat{\xi}^\gamma \right) \\ &\quad - g \mathbf{v} \cdot \left(\delta \mathbf{u}_{,\alpha\beta}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) \Delta \hat{\xi}^\beta + \Delta \mathbf{u}_{,\alpha\beta}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) \delta \hat{\xi}^\beta \right) \\ &\quad + \left(\delta \mathbf{u}^{[1]}(\mathbf{x}) - \delta \mathbf{u}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) \right) \cdot \left(\Delta \mathbf{u}_{,\alpha}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) + \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha,\gamma} \Delta \hat{\xi}^\gamma \right) \\ &\quad + \left(\Delta \mathbf{u}^{[1]}(\mathbf{x}) - \Delta \mathbf{u}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) \right) \cdot \left(\delta \mathbf{u}_{,\alpha}^{[2]}(\hat{\mathbf{y}}) + \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha,\gamma} \delta \hat{\xi}^\gamma \right) , \end{aligned} \quad (7.44)$$

mit

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} = \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} + g \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta} \right) = \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} + g \mathbf{v} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha,\beta} \right) . \quad (7.45)$$

Eine ausführliche Herleitung findet sich wiederum bei Özdemir (2003).

Für den letzten Term $\Delta t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^\alpha$ der Linearisierung Gl. (7.41) muss zunächst die Zeitintegration

des Reibgesetzes eingeführt werden. Er wird daher nach deren Einführung in Kap. 7.6 angegeben. Es bleibt noch zu betonen, dass bisher weder in zeitlicher noch in räumlicher Hinsicht einschränkende Annahmen gemacht wurden. Die bis hier gegebene Formulierung ist inklusive ihrer Linearisierung daher offen für jegliche Form der räumlichen Diskretisierung und die Anwendung eines geeigneten Zeitintegrationsverfahrens. Wie bereits erwähnt ist lediglich die Linearisierung der Reibkräfte ohne eine Festlegung auf ein bestimmtes Integrationsverfahren für die in Ratenform formulierte Coulombsche Reibung nicht möglich, da die hieraus resultierende algorithmische Reibtangente von der Art der zeitlichen Diskretisierung abhängt.

7.5 Räumliche Diskretisierung des Kontakts

In diesem Kapitel wird die räumliche Diskretisierung der schwachen Form und ihrer Linearisierung unter Verwendung von Finiten Elementen auf der Basis der 7-Parameter Schalenformulierung durchgeführt. Dabei erfolgt eine Beschränkung auf vierknotige Finite Elemente mit linearen Interpolationsfunktionen und die Wahl einer sogenannten *Knoten-Segment*-Diskretisierung des Kontakts (node to segment contact), die in Abb. 7.11 anhand eines zweidimensionalen Schnittes schematisch für die Schale dargestellt ist. Wichtig dabei ist, dass die gesamte Kontaktformulierung lediglich von der Geometriebeschreibung und der Deformation der Kontaktflächen abhängt, die Deformation der Schalenkörper im Inneren sowie die verwendeten Materialien der Körper spielen dabei keine Rolle.

Die Diskretisierung der Geometrie und der Deformation der Schalenoberfläche ist zum Teil über die Semidiskretisierung in Dickenrichtung aus Kap. 2.2.2 gegeben. Das diskretisierte Verschiebungsfeld der kontaktierenden Schalenoberfläche lautet mit bilinearen Lagrange-Ansatzfunktionen dadurch:

$$\mathbf{u}_h^{[\alpha]}(\theta^1, \theta^2) = \sum_{n=1}^{N_{nd}^{el}=4} N_n(\theta^1, \theta^2) (\mathbf{v}_{nd}^n + \theta^3 \mathbf{w}_{nd}^n), \quad \theta^1, \theta^2 \in [-1, 1], \quad \theta^3 = 1, -1. \quad (7.46)$$

Für $\theta^3 = 1$ erhält man das Verschiebungsfeld der Schalenoberseite und mit $\theta^3 = -1$ das Verschiebungsfeld für die Schalenunterseite (Abb. 7.11, siehe auch Kap. 2.2.2, Abb. 2.3). θ^i sind hier im Gegensatz zur Einführung der Schalenformulierung in Kap. 2 Elementkoordinaten. Die Diskretisierung der Testfunktionen $\delta \mathbf{u}_h^{[\alpha]}$ erfolgt analog zu Gl. (7.46).

Bei der *Knoten-Segment* Diskretisierung des Kontakts werden die Kontaktbeziehungen zwischen einem diskreten Knoten der Slave-Kontaktfläche und einem Oberflächensegment der Masterseite aufgestellt, das einem Finiten Element mit hier bilinearer Interpolation der Geometrie entspricht (Abb. 7.11). Dies ist die wohl einfachste und numerisch preiswerteste Möglichkeit einer Kontaktdiskretisierung. Sie führt in vielen Anwendungsbereichen zu einer brauchbaren globalen Lösung, ist jedoch aufgrund der C^0 -kontinuierlichen Interpolation der Kontaktflächen

nicht geeignet, lokale Kontaktphänomene wie beispielsweise Kontaktpressungsverteilungen zu untersuchen. Es soll zusätzlich angemerkt werden, dass diese Art der Kontaktdiskretisierung einen Patch-Test für Kontakt, bei dem eine konstante Kontaktspannung in der Fuge auch bei nicht-konformer Diskretisierung der kontaktierenden Körper erzielt werden können muss, nicht erfüllt. Dieser Ansatz liefert eine gute globale Lösung, ergibt jedoch aufgrund der nur C^0 -kontinuierlichen Interpolation der Kontaktflächen eine recht ungenaue Approximation der Kontaktpressungsverteilung in der Kontaktfuge.

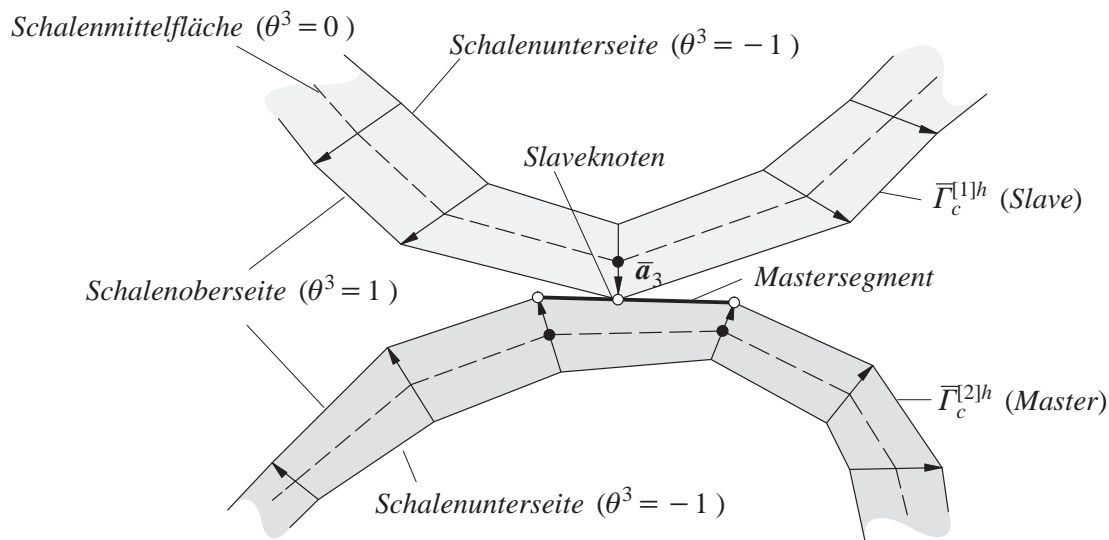


Abb. 7.11: Knoten-Segment Diskretisierung des Kontakts bei Finiten Schalenelementen
Neben dieser Form der Kontaktdiskretisierung existieren eine Reihe weiterer Möglichkeiten, von denen hier ohne nähere Ausführungen noch der Knoten-Knoten-Kontakt und der Segment-Segment Kontakt sowie sogenannte *smooth contact*-Formulierungen erwähnt werden sollen, bei denen eine glatte C^1 -kontinuierliche Interpolation zumindest der Masterseite beispielsweise mittels kubischer Hermitescher Polynome oder kubischer Bezier-Interpolation (Wriggers (2002)) erfolgt. Erwähnt werden sollen noch die Kontaktdiskretisierungen auf der Basis sogenannter Mortar-Methoden (McDevitt und Laursen (2000), Puso und Laursen (2003), Wohlmuth (2001)), deren Entwicklung im Falle dreidimensionaler Strukturen und großer Deformationen Gegenstand aktueller Forschungen ist.

Die diskrete Form des Kontaktintegrals Gl. (7.30) kann als Summe der Integrale über einzelne Segmente von $\Gamma_c^{[1]h}$ ausgedrückt werden:

$$\delta \Pi_c(\mathbf{u}_h, \delta \mathbf{u}_h) = \sum_{n=1}^{N_{el}} \int_{\Gamma_{cn}^{[1]h}} t_N^h \delta g^h + t_{T\alpha}^h \delta \hat{\xi}^{\alpha h} d\Gamma . \quad (7.47)$$

Mittels einer numerischen Integration mit N^{ip} Integrationspunkten je Segment in den Orten ξ_k

mit Wichtungsfaktoren w_k führt das Kontaktintegral auf:

$$\delta\Pi_c(\mathbf{u}_h, \delta\mathbf{u}_h) = \sum_{n=1}^{N^{el}} \left[\sum_{k=1}^{N^{ip}} \left(t_N^h(\xi_k) \delta g^h(\xi_k) + t_{T\alpha}^h(\xi_k) \delta \hat{\xi}^{\alpha h}(\xi_k) \right) w_k J(\xi_k) \right]. \quad (7.48)$$

$J(\xi_k)$ ist hierin die Jacobi–Determinante der Abbildung zwischen dem Parameterraum ξ^α und der wirklichen Geometrie und ergibt sich aus

$$J(\xi) = \| \mathbf{g}_1(\xi) \times \mathbf{g}_2(\xi) \|, \quad (7.49)$$

mit $\mathbf{g}_\alpha(\xi_k)$ als kovariante Basisvektoren der Schalenoberfläche $\Gamma_c^{[1]h}$ im Integrationspunkt ξ_k der Schalenoberfläche. Diese lassen sich mit der Semidiskretisierung der Schale in Dickenrichtung (Kapitel 2.2.2) durch die Basisvektoren der Schalenmittelfläche im entsprechenden Schalenmittelflächenort θ_k ausdrücken:

$$\mathbf{g}_\alpha(\theta) = \mathbf{a}_\alpha(\theta) + \theta^3 \mathbf{a}_{3,\alpha}(\theta), \quad \theta = (\theta^1, \theta^2) \in [1, -1], \quad \theta^3 = 1, -1. \quad (7.50)$$

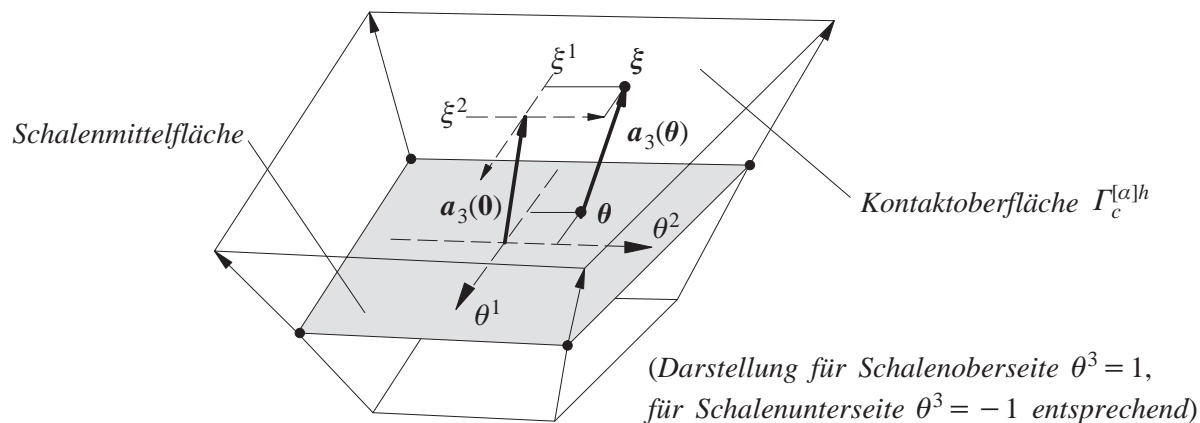


Abb. 7.12: Lokalkoordinatensysteme der diskreten Ober- und Mittelfläche der Schale

Der Zusammenhang zwischen den Elementkoordinaten der kontaktierenden Schalenoberflächen ξ^α und den ihnen entsprechenden Elementkoordinaten der Schalenmittelfläche θ^α ist in Abb. 7.12 veranschaulicht.

Wie in Gl. (7.47) zu erkennen, wird das Kontaktintegral über die Slave–Kontaktfläche $\Gamma_c^{[1]h}$ ausgewertet. Die Lage der Integrationspunkte wird identisch zu der Lage der Slave–Knoten auf $\Gamma_c^{[1]h}$ gewählt (Knotenintegration oder *nodal quadrature*), so dass sich für die Koordinaten ξ_k beziehungsweise deren Mittelflächen–Entsprechungen θ_k und deren Gewichte w_k

$$\begin{aligned} \theta_1 = \xi_1 = -1, -1, \quad \theta_2 = \xi_2 = -1, 1, \\ \theta_3 = \xi_3 = 1, 1, \quad \theta_4 = \xi_4 = 1, -1, \quad w_k = 1, \quad k = 1, \dots, 4 \end{aligned} \quad (7.51)$$

ergibt. Die Jacobi–Determinante Gl. (7.49) enthält dann Beiträge von allen an den Integrationspunkt/Slaveknoten angrenzenden Segmenten, was in Abb. 7.13 dargestellt ist.

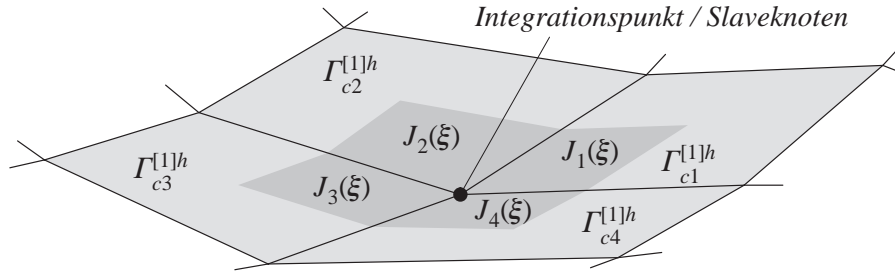


Abb. 7.13: Knotenintegration des Kontaktintegrals – Auswertung der Jacobi-Determinante

7.6 Zeitliche Diskretisierung der Reibung

Zur Einbettung des Kontakts in die in Kap. 2.3 vorgestellte Generalized- α Zeitintegration werden die in einem Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ interpolierten Kontaktkräfte

$$\mathbf{f}_{n+1-\alpha_f}^c = (1-\alpha_f)\mathbf{f}_{n+1}^c + \alpha_f\mathbf{f}_n^c \quad (7.52)$$

dem dynamischen Gleichgewicht Gl. (2.56) hinzugefügt:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{d}}_{n+1-\alpha_m} + \mathbf{f}_{n+1-\alpha_f}^{int} + \mathbf{f}_{n+1-\alpha_f}^c - \mathbf{f}_{n+1-\alpha_f}^{ext} = \mathbf{0} . \quad (7.53)$$

7.6.1 Zeitintegration des Reibgesetzes (Penalty-regularisierte Variante)

Zur Berechnung von \mathbf{f}_{n+1}^c in Gl. (7.52) muss eine Zeitintegration des in Ratenform gegebenen Coulombschen Reibgesetzes Gl. (7.34) vorgenommen werden. Die Anwendung einer backward-Euler-Integration auf Gl. (7.34) liefert:

$$\begin{aligned} \Phi_{n+1} &= \|\mathbf{t}_{Tn+1}\| - \mu t_{Nn+1} \leq 0 , \\ t_{T\alpha n+1} &= t_{T\alpha n} + \epsilon_T \left(\bar{\nu}_{\alpha\beta} \left(\hat{\xi}_{n+1}^\beta - \hat{\xi}_n^\beta \right) - \dot{\gamma} \frac{t_{T\alpha n+1}}{\|\mathbf{t}_{T\alpha n+1}\|} \right) , \quad \dot{\gamma} \geq 0 , \\ \dot{\gamma} \Phi_{n+1} &= 0 . \end{aligned} \quad (7.54)$$

Gl. (7.54) operiert ausschließlich mit Verschiebungen als Unbekannten und die Aktualisierung der Reibkräfte erfolgt in Abhängigkeit der kinematischen Größen g_{n+1} zur Berechnung von t_{Nn+1} sowie von $\hat{\xi}_{n+1}^\beta - \hat{\xi}_n^\beta$.

7.6.2 Rückprojektionsalgorithmus für Haft- und Gleitreibung

Gl. (7.54) wird gelöst, indem ein Prediktor-Korrektor-Verfahren angewendet wird, wie es bei elasto-plastischer Materialmodellierung gebräuchlich ist.

Zunächst erfolgt ein Prediktor–Schritt, in dem von einem Haftreibungszustand ausgegangen wird:

$$\begin{aligned}
 t_{Nn+1} &= \epsilon_N \langle g_{n+1} \rangle , \\
 t_{T\alpha n+1}^{pred} &= t_{T\alpha n} + \epsilon_T \bar{\tau}_{\alpha\beta} \left(\hat{\xi}_{n+1}^\beta - \hat{\xi}_n^\beta \right) , \\
 \Phi_{n+1}^{pred} &= \| t_{Tn+1}^{pred} \| - \mu t_{Nn+1} .
 \end{aligned}
 \tag{7.55}$$

Anschließend erfolgt die Überprüfung der Gleitbedingung und im Falle einer Verletzung die Rückprojektion (Korrektor) (siehe auch Abb. 7.14):

$$t_{T\alpha n+1} = \begin{cases} t_{T\alpha n+1}^{pred} & \text{Wenn } \Phi_{n+1}^{pred} \leq 0 \text{ (Haften) ,} \\ \mu t_{Nn+1} \frac{t_{T\alpha n+1}^{pred}}{\| t_{Tn+1}^{pred} \|} & \text{sonst (Gleiten) .} \end{cases}
 \tag{7.56}$$

Abb. 7.14 veranschaulicht sehr gut die nicht–assozierte Natur der Rückprojektion.

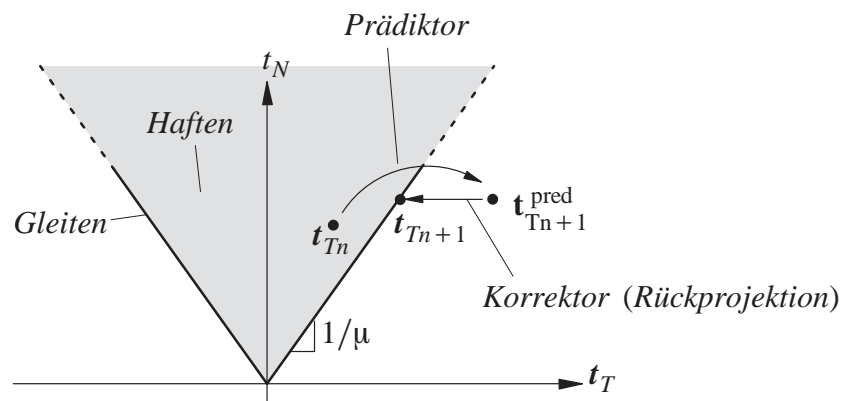


Abb. 7.14: Graphische Darstellung des Prädiktor–Korrektor Algorithmus (zweidimensionale Darstellung)

Die Rückprojektion erfolgt parallel zur Gleit– und Reibkraftebene, die physikalisch nicht sinnvolle und daher fehlende Normalkomponente in der Rückprojektion führt zur dieser Nichtassoziiertheit, die sich dann auch als Unsymmetrie in der resultierenden Reibsteifigkeitsmatrix ausdrückt.

7.6.3 Linearisierung der Reibkräfte

Die Linearisierung der Reibkontaktkräfte Kap. 7.4 kann nun mit dem vorliegenden algorithmischen Reibgesetz Gl. (7.55) und (7.56) vervollständigt werden. Für den in Kap. 7.4 noch fehlenden Term

$$\int_{\Gamma_c^{(1)}} \Delta t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^\alpha d\Gamma$$

folgt $\delta \hat{\xi}^\alpha$ aus Gl. (7.29) mit der Abkürzung

$$\boldsymbol{\pi}_T = \frac{\mathbf{t}_{Tn+1}^{pred}}{\|\mathbf{t}_{Tn+1}^{pred}\|} \quad (7.57)$$

nach einigen Operationen für $\Delta t_{T\alpha n+1}$:

$$\Delta t_{T\alpha n+1} = \begin{cases} \Delta t_{T\alpha n+1}^{pred} = \epsilon_T \left(\tau_{\alpha\beta} \Delta \hat{\xi}^\beta + \tau_{\alpha\beta,\gamma} \Delta \hat{\xi}^\gamma \left(\hat{\xi}_{n+1}^\beta - \hat{\xi}_n^\beta \right) \right) & \text{(Haften)} \\ \mu \epsilon_N H(g) \boldsymbol{\pi}_{T\alpha} \Delta g + \frac{\mu t_{Nn+1}}{\|\mathbf{t}_{Tn+1}^{pred}\|} \Delta t_{T\beta n+1}^{pred} \left(\delta_\alpha^\beta - \boldsymbol{\pi}_T^\beta \boldsymbol{\pi}_{T\alpha} \right) \\ \quad + \mu t_{Nn+1} \boldsymbol{\pi}_T \cdot \left(\Delta \mathbf{u}_{,\beta}^{[2]}(\hat{\xi}) + \bar{\tau}_{\beta,\gamma} \Delta \hat{\xi}^\gamma \right) \boldsymbol{\pi}_T^\beta \boldsymbol{\pi}_{T\alpha} & \text{(Gleiten)} \end{cases} \quad (7.58)$$

Hierin ist δ_α^β das Kronecker-Symbol, und $H(\cdot)$ ist die Heaviside-Funktion, die den Wert Eins für einen positiven Operanden liefert und ansonsten Null ist. Für eine detaillierte Herleitung von Gl. (7.58) wird auf Özdemir (2003) verwiesen.

7.7 Matrizenformulierung

Für die Verwendung des Kontakts mit der in Kap. 7.5 eingeführten Knoten-Segment-Diskretisierung im Rahmen der 7-Parameter-Schalenformulierung müssen Matrizen- und Vektornotationen entwickelt werden, die die Beschreibung der kontaktierenden Schalenoberflächen und deren Deformation über die Schalenmittelfläche und einen Direktor, beziehungsweise über Mittelflächen- und Differenzverschiebungen der Schale berücksichtigen. Die geometrischen Kontaktbedingungen wie Inpenetrabilität und die Kontaktkräfte sollen in der gegebenen Form für die Ober- und Unterseite der Schale gelten.

Die Knoten-Segment-Diskretisierung des Kontakts nimmt dann unter Annahme der hier ausschließlich betrachteten vierknotigen, bilinearen Schalenelemente die in Abb. 7.15 dargestellte Gestalt an.

Konsistent mit der in Kap. 7.5 eingeführten numerischen Integration, bei der die Integrationspunkte mit den Slaveknoten identisch sind, werden Vektoren \mathbf{d}_c , $\delta \mathbf{d}_c$ und $\Delta \mathbf{d}_c$ für die *Kontaktgruppe*, bestehend aus den Freiheitsgraden der vier Knoten des Kontaktsegments der Masterseite und den Freiheitsgraden des kontaktierenden Slaveknotens/Integrationspunkts eingeführt:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_c^T &= \left[\mathbf{v}_s^{[1]T} \quad \mathbf{w}_s^{[1]T} \quad \mathbf{v}_1^{[2]T} \quad \mathbf{w}_1^{[2]T} \quad \mathbf{v}_2^{[2]T} \quad \mathbf{w}_2^{[2]T} \quad \mathbf{v}_3^{[2]T} \quad \mathbf{w}_3^{[2]T} \quad \mathbf{v}_4^{[2]T} \quad \mathbf{w}_4^{[2]T} \right], \\ \delta \mathbf{d}_c^T &= \left[\delta \mathbf{v}_s^{[1]T} \delta \mathbf{w}_s^{[1]T} \quad \delta \mathbf{v}_1^{[2]T} \quad \delta \mathbf{w}_1^{[2]T} \quad \delta \mathbf{v}_2^{[2]T} \quad \delta \mathbf{w}_2^{[2]T} \quad \delta \mathbf{v}_3^{[2]T} \quad \delta \mathbf{w}_3^{[2]T} \quad \delta \mathbf{v}_4^{[2]T} \quad \delta \mathbf{w}_4^{[2]T} \right], \quad (7.59) \\ \Delta \mathbf{d}_c^T &= \left[\Delta \mathbf{v}_s^{[1]T} \Delta \mathbf{w}_s^{[1]T} \quad \Delta \mathbf{v}_1^{[2]T} \quad \Delta \mathbf{w}_1^{[2]T} \quad \Delta \mathbf{v}_2^{[2]T} \quad \Delta \mathbf{w}_2^{[2]T} \quad \Delta \mathbf{v}_3^{[2]T} \quad \Delta \mathbf{w}_3^{[2]T} \quad \Delta \mathbf{v}_4^{[2]T} \quad \Delta \mathbf{w}_4^{[2]T} \right]. \end{aligned}$$

$\Theta \delta d_c$ und $\Theta \Delta d_c$ sind nun Knotenwerte für die Variation und das Inkrement der Oberflächenverschiebungen in allen denkbaren Kontaktkombinationen:

- Gl. (7.60) mit $\theta^{3[1]} = 1$ und $\theta^{3[2]} = 1$ für einen Kontakt
Slave–Schalenoberseite – Master–Schalenoberseite
- Gl. (7.60) mit $\theta^{3[1]} = 1$ und $\theta^{3[2]} = -1$ für einen Kontakt
Slave–Schalenoberseite – Master–Schalenunterseite
- Gl. (7.60) mit $\theta^{3[1]} = -1$ und $\theta^{3[2]} = 1$ für einen Kontakt
Slave–Schalenunterseite – Master–Schalenoberseite
- Gl. (7.60) mit $\theta^{3[1]} = -1$ und $\theta^{3[2]} = -1$ für einen Kontakt
Slave–Schalenunterseite – Master–Schalenunterseite

Setzen wir für den Moment voraus, dass der Projektionspunkt $\hat{\xi}$ beziehungsweise seine Schalenmittelflächenentsprechung $\hat{\theta}$ sowie die auswärtsgerichtete Normale in diesem Punkt \mathbf{v} bekannt seien (deren Ermittlung folgt im Rahmen der Kontaktsuche Kap. 7.9), so folgen die Normal- und Reibkontaktkräfte aus

$$\delta \Pi_c^{el}(\mathbf{d}_c, \delta \mathbf{d}_c) = \int_{\Gamma_c^{[1]h}} t_N \delta g^h + t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^{\alpha h} d\Gamma = \delta \mathbf{d}_c^T \Theta^T \int_{\Gamma_c^{[1]h}} t_N \mathbf{N}^c + t_{T1} \mathbf{D}_1^c + t_{T2} \mathbf{D}_2^c d\Gamma, \quad (7.61)$$

und die Steifigkeitsmatrizen des Normal- und Tangentialkontakts mit Gl. (7.43), Gl. (7.44) und Gl. (7.58) zu:

$$\Delta \delta \Pi_c(\mathbf{d}_c, \delta \mathbf{d}_c) = \int_{\Gamma_c^{[1]h}} \Delta \left(t_N \delta g + t_{T\alpha} \delta \hat{\xi}^{\alpha} \right) d\Gamma = \delta \mathbf{d}_c^T \Theta^T \int_{\Gamma_c^{[1]h}} \mathbf{K}_N^c + \mathbf{K}_T^c d\Gamma \Theta \Delta \mathbf{d}_c. \quad (7.62)$$

Die Vektoren \mathbf{N}^c und \mathbf{D}_α^c sowie die Ausdrücke für die Steifigkeitsmatrizen \mathbf{K}_N^c und \mathbf{K}_T^c werden aufgrund ihrer Länge im Anhang A4 angegeben.

7.8 Algorithmische Augmented–Lagrange–Regularisierung

Wie bereits erwähnt, ist die Penalty–Regularisierung bei endlichen Penalty–Parametern ϵ_N und ϵ_T nicht in der Lage, die Ungleichheitsnebenbedingungen des Normal- und Reibkontakts exakt zu erfüllen. Die Wahl sehr großer Werte für die Penalty–Parameter wiederum führt zu einer schlechten Konditionierung der resultierenden Steifigkeitsmatrizen. Zudem ist der Betrag der Penalty–Parameter physikalisch nicht zu motivieren und das Ausmaß der tolerierbaren Verletzung der Ungleichheitsnebenbedingungen problemabhängig.

Im Rahmen des Kontakts sehr dünner Strukturen kommt dem noch eine besondere Bedeutung zu, da Verletzungen der Inpenetrabilitätsbedingung (Überlappungen der kontaktierenden Kör-

per) in Relation zur Körperdicke klein sein müssen, da es sonst leicht zur vollständigen Durchdringung der Körper kommt, was zu erheblichen Schwierigkeiten im Rahmen der Kontaktalgorithmien führt.

Die Augmented–Lagrange–Regularisierung ist (neben der Einführung von Lagrange–Multiplikatoren als zusätzliche primäre Variablen) eine Möglichkeit, die Kontaktbedingungen mit einer beliebigen, nur durch die Rechengenauigkeit beschränkten Genauigkeit zu erfüllen, weshalb sie hier für dünne Schalen eingesetzt wird.

Für die Augmented–Lagrange–Regularisierung (Kap. 7.3.2) muss ein Lösungsalgorithmus zur Bestimmung der Lagrange–Multiplikatoren eingeführt werden. Hierzu wird der sogenannte *Uzawa–Algorithmus* verwendet. Ausgangspunkt ist die zeitlich diskretisierte Form der Bedingungen Gl. (7.39) für die Lagrange–Multiplikatoren:

$$g_{n+1} \leq 0, \quad \lambda_{Nn+1} \geq 0, \quad \lambda_{Nn+1} g_{n+1} = 0, \quad (7.63)_1$$

$$\Phi(\lambda_{Tan+1}, \lambda_{Nn+1}) \leq 0, \quad (7.63)_2$$

$$\bar{\tau}_{\alpha\beta} \left(\hat{\xi}_{n+1}^{\beta} - \hat{\xi}_n^{\beta} \right) = \dot{\gamma}_{\lambda} \frac{\lambda_{Tan+1}}{\left(\lambda_{T\beta n+1} \bar{\tau}^{\beta\gamma} \lambda_{T\gamma n+1} \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad \dot{\gamma}_{\lambda} \geq 0, \quad (7.63)_3$$

$$\dot{\gamma}_{\lambda} \Phi(\lambda_{Tan+1}, \lambda_{Nn+1}) = 0. \quad (7.63)_4$$

Die Lagrange–Multiplikatoren werden dann durch eine Iteration mit Iterationszähler k ausgedrückt:

$$\lambda_{Nn+1}^{k+1} = \langle \lambda_{Nn+1}^k + \epsilon_N g_{n+1}^k \rangle \quad (7.64)_1$$

$$\lambda_{Tan+1}^{k+1} = \lambda_{Tan+1}^k + \epsilon_T \left[\bar{\tau}_{\alpha\beta} \left(\hat{\xi}_{n+1}^{\beta k} - \hat{\xi}_n^{\beta} \right) - \dot{\gamma}_{\lambda} \frac{\lambda_{Tan+1}^{k+1}}{\left(\lambda_{T\beta n+1}^{k+1} \bar{\tau}^{\beta\gamma} \lambda_{T\gamma n+1}^{k+1} \right)^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (7.64)_2$$

Zur Aktualisierung von λ_{Nn+1} wird demnach wie bei der Penalty–Regularisierung die Bestrafung einer Überlappung verwendet, die tangentiellen Lagrange–Multiplikatoren λ_{Tan+1} werden mit einer Bestrafung des Residuums von Gl. (7.63)₃ aktualisiert.

Exemplarisch ist die inkrementelle Verbesserung der Lagrange–Multiplikatoren für λ_{Nn+1} in Normalenrichtung des Kontakts in Abb. 7.16 graphisch dargestellt. Man erkennt, dass mit zunehmender Anzahl an Iterationen k der Lagrange–Multiplikator λ_{Nn+1}^k sich dem genauen Wert rasch nähert, wobei gleichzeitig die Überlappung g^k gegen Null strebt.

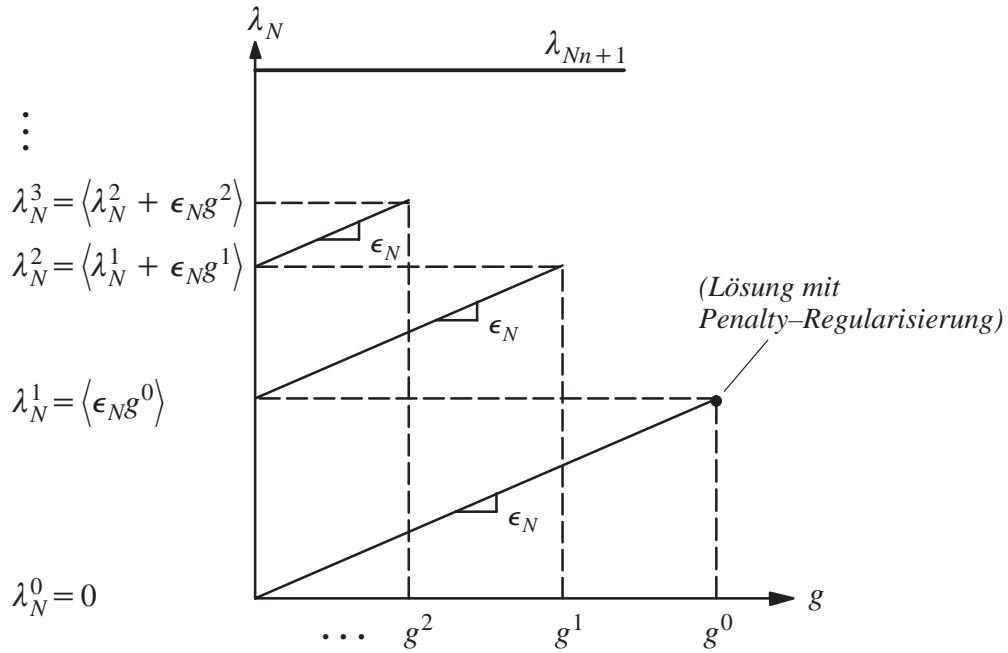


Abb. 7.16: Uzawa-Algorithmus

Zur Anwendung der Augmented-Lagrange-Regularisierung sind an der gegebenen Formulierung mit Penalty-Regularisierung kaum Änderungen an den Kontaktkräften und den Kontaktsteifigkeitsmatrizen nötig. Die Ermittlung der Kontaktkräfte lautet nun im Gegensatz zu Gl. (7.55) und (7.56):

$$\begin{aligned}
 t_{Nn+1}^k &= \langle \lambda_{Nn+1}^k + \epsilon_N g_{n+1}^k \rangle, \\
 t_{Ta n+1}^{pred k} &= \lambda_{Ta n+1}^k + \epsilon_T \bar{v}_{\alpha\beta} \left(\hat{\xi}_{n+1}^{\beta k} - \hat{\xi}_n^{\beta} \right), \\
 \Phi_{n+1}^{pred k} &= \| t_{Tn+1}^{pred k} \| - \mu t_{Tn+1}^k, \\
 t_{Ta n+1}^k &= \begin{cases} t_{Ta n+1}^{pred k} & \text{Wenn } \Phi_{n+1}^{pred k} \leq 0 \text{ (Haften) ,} \\ \mu t_{Nn+1}^k \frac{t_{Ta n+1}^{pred k}}{\| t_{Tn+1}^{pred k} \|} & \text{sonst (Gleiten) .} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{7.65}$$

Für die Linearisierung der Kontaktkräfte und die resultierenden Steifigkeitsmatrizen muss in Gl. (7.43) lediglich der Ausdruck für Δt_N ersetzt werden durch:

$$\Delta t_N = \Delta \langle \lambda_N^k + \epsilon_N g \rangle = H(\lambda_N^k + \epsilon_N g) \epsilon_N \Delta g . \tag{7.66}$$

Der Effekt hiervon ist einfach: Jedes Vorkommen der Heaviside-Funktion $H(g)$ in den Kontaktsteifigkeitsmatrizen wird ersetzt durch $H(\lambda_N^k + \epsilon_N g)$. Dies bedeutet, dass die Entscheidung, ob Kontakt herrscht, nun nicht mehr anhand des geometrischen Kriteriums der Überlappung, sondern anhand der aktuellen Normalkontaktkräfte getroffen wird. Dies verhindert eine 'Instabili-

tät' in der Gleichgewichtsiteration, die bei einer geometrischen Entscheidung aufgrund $H(g)$ bei Erreichen sehr kleiner Klaffungen $g \approx 0$ dazu führt, dass die Gleichgewichtsiteration zwischen den Zuständen "Kontakt" und "kein Kontakt" alterniert und somit kein Gleichgewicht erreicht wird.

Ein Schema für den Gesamtalgorithmus der Augmented–Lagrange–Iteration im Rahmen der Generalized- α Zeitintegration findet sich im Anhang A4.2.

7.9 Kontaktsuche

Bis hier wurde vorausgesetzt, dass die räumliche Konfiguration der Kontaktgruppe, bestehend aus einem Slave–Knoten/Integrationspunkt und einem Segment der Masteroberfläche, bekannt ist. Sieht man von den Sonderfällen einer rein zweidimensionalen Situation sowie der Beschränkung auf infinitesimale Deformationen ab, so verursacht das Auffinden dieser Kontaktgruppen einen überwiegenden Anteil am numerischen Aufwand des Kontakts.

Zusätzliche Anforderungen an die Kontaktsuche entstehen aus der Schlankheit der Schalenstrukturen, aus der Realisierung von 'Selbstkontakt', bei dem entfernte Teile desselben Körpers sich berühren, sowie aus der parallelen Abarbeitung der Suchalgorithmen als auch der parallelen Ermittlung der Kontaktkräfte und –Steifigkeiten.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Kontaktsuche beinhaltet:

- Kontakt zwischen Schalenober– und Unterseiten in beliebiger Kombination ohne die explizite Definition einer Slave– und Masterseite durch den Anwender, so dass Selbstkontakt möglich ist
- Gleichzeitiger Kontakt auf der Schalenober– und Unterseite
- Die Ermittlung der Geschichtsvariablen des Reibkontakts mit einer Näherung für den Fall, dass Reibung über die Grenzen eines Kontaktsegments hinweg stattfindet
- Die Detektion spezieller 'pathologischer Fälle', die aus der Schlankheit der betrachteten Strukturen resultieren, mittels Geschichtsvariablen der Kontaktsuche
- Effiziente räumliche Suchalgorithmen, die sich den auftretenden großen Deformationen anpassen
- Parallele Abarbeitung der Kontaktsuche und parallele Ermittlung der Kontaktkräfte– und Steifigkeiten im Rahmen der Parallelität auf der Basis von Gebietszerlegung

Auf die parallele Umsetzung der Kontaktsuche wird hieraus Platzgründen nicht eingegangen, die Behandlung der Geschichtsvariablen des Reibkontakts erfolgt analog zu den Ausführungen in Laursen (2002). Es wird der Suchalgorithmus dargestellt, sowie einige für die Kontaktsuche problematische Fälle diskutiert, die sich aus der Dünnwandigkeit der Strukturen ergeben.

Das zu behandelnde Suchproblem besagt: Finde für jeden Schalen–Slaveknoten s der diskretisierten Struktur einen Projektionspunkt $\hat{\theta}$ in konvektiven Elementkoordinaten auf einem Schalenelement \hat{e} , so dass nach Gl. (7.5) für die Klaffung g gilt

$$|g| = \underbrace{|\mathbf{v}(\hat{\theta}) \cdot (\bar{\mathbf{r}}_s + \theta^{3[1]}\bar{\mathbf{a}}_{3s})|}_{\text{Slaveknoten – Schalenoberfläche}} - \underbrace{\sum_{i=1}^4 N_i^{\hat{e}}(\hat{\theta})(\bar{\mathbf{r}}_m^i + \theta^{3[2]}\bar{\mathbf{a}}_{3m}^i)}_{\text{Projektionspunkt – Schalenoberfläche}} \rightarrow \min, \quad \theta^{3[1]}, \theta^{3[2]} = 1, -1. \quad (7.67)$$

Hierin sind $\bar{\mathbf{r}}_s$ und $\bar{\mathbf{a}}_{3s}$ Mittelflächenkoordinaten und Direktor des Schalen–Slaveknoten s , $N_i^{\hat{e}}$ sind bilineare Ansatzfunktionen des (unbekannten) Elementes \hat{e} und $\bar{\mathbf{r}}_m^i$ und $\bar{\mathbf{a}}_{3m}^i$ sind Knotenwerte der Schalenmittelflächenkoordinaten und Direktoren der vier Knoten von \hat{e} (Abb. 7.17).

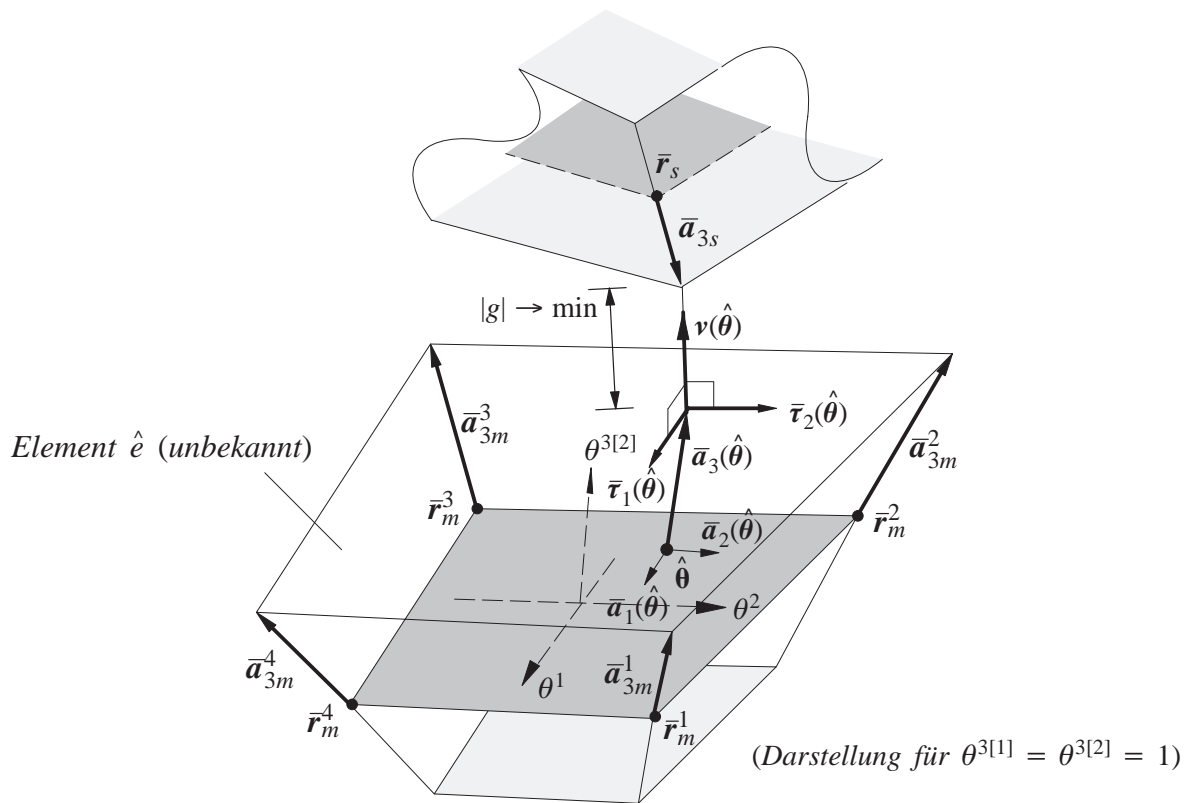


Abb. 7.17: Suchproblem des Schalenkontakts

Sind Element \hat{e} und Lokalkoordinaten des Projektionspunktes $\hat{\theta}$ in \hat{e} gefunden, so erlaubt das Vorzeichen von g nach Gl. (7.6) die Entscheidung, ob Kontakt vorliegt oder nicht.

Aus Gl. (7.67) wird bereits ersichtlich, dass es in Abhängigkeit von $\theta^{3[1]} = 1, -1$ für die Schalenober– und Unterseite an einem Slaveknoten s gleichzeitig zwei unterschiedliche Lösungen geben kann (Abb. 7.18), der Slaveknoten demnach mit seiner Schalenober– und Unterseite mit zwei verschiedenen Masterelementen kontaktieren können muss.

Bei Berücksichtigung von Selbstkontakt ist *jeder* Knoten einer Diskretisierung ein Slaveknoten und *jedes* Element ein potentiell Kontaktsegment. Die direkte Auswertung von Gl. (7.67) in allen möglichen Knoten/Segment-Paarungen ist aus Aufwandsgründen nicht möglich.

Die Suche wird daher in drei aufeinanderfolgende Phasen eingeteilt, beginnend mit einer groben Vorauswahl der potentiellen Kontaktmöglichkeiten und folgender allmählicher Verfeinerung bis hin zur Ermittlung des Projektionspunktes $\hat{\theta}$ in einem bestimmten Element. Dabei kommen in den einzelnen Suchphasen unterschiedliche Suchalgorithmen und geometrische Annahmen zum Einsatz, die im folgenden gezeigt werden.

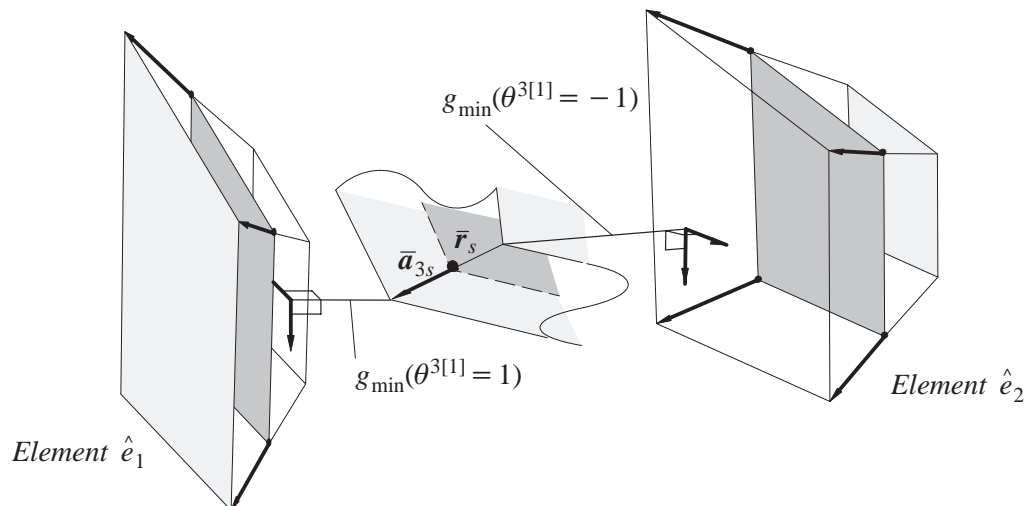


Abb. 7.18: gleichzeitiger Kontakt der Schalenober- und Unterseite an einem Slaveknoten s

7.9.1 Grobsuche: Bucket-Sort Algorithmus für Schalenmittelflächenkoordinaten

Eine erste Einengung der potentiellen Kontaktmöglichkeiten eines Slaveknotens s wird mit dem sogenannten *Bucket-Sort-Algorithmus* vorgenommen, wie er in Benson und Hallquist (1990) für Schalenprobleme angewandt wird.

Aufgrund der Annahme, dass hier ausschließlich dünnwandige Strukturen betrachtet werden, bei denen die Schalendicke im Verhältnis zu den Gesamtkörperabmessungen klein ist, werden in dieser Suchphase nur Mittelflächenkoordinaten der Schalenknoten betrachtet.

Ziel des Bucket-Sort Algorithmus ist es, zu einem Slaveknoten s eine beschränkte Anzahl an Masterknoten m_j zu finden, die in der Momentankonfiguration räumlich in der Nähe von s liegen. Die an diese Masterknoten anliegenden Finiten Elemente stellen dann potentielle Kontaktsegmente dar.

Hierzu wird ein die Gesamtstruktur umhüllender Quader geschaffen, der in einzelne Sektoren unterteilt wird. Abb. 7.19 zeigt dies aus Anschaulichkeitsgründen im zweidimensionalen Fall. Die Größe und damit die Anzahl der Sektoren richtet sich nach den Abmessungen des größten Elements der Diskretisierung (Benson und Hallquist (1990)).

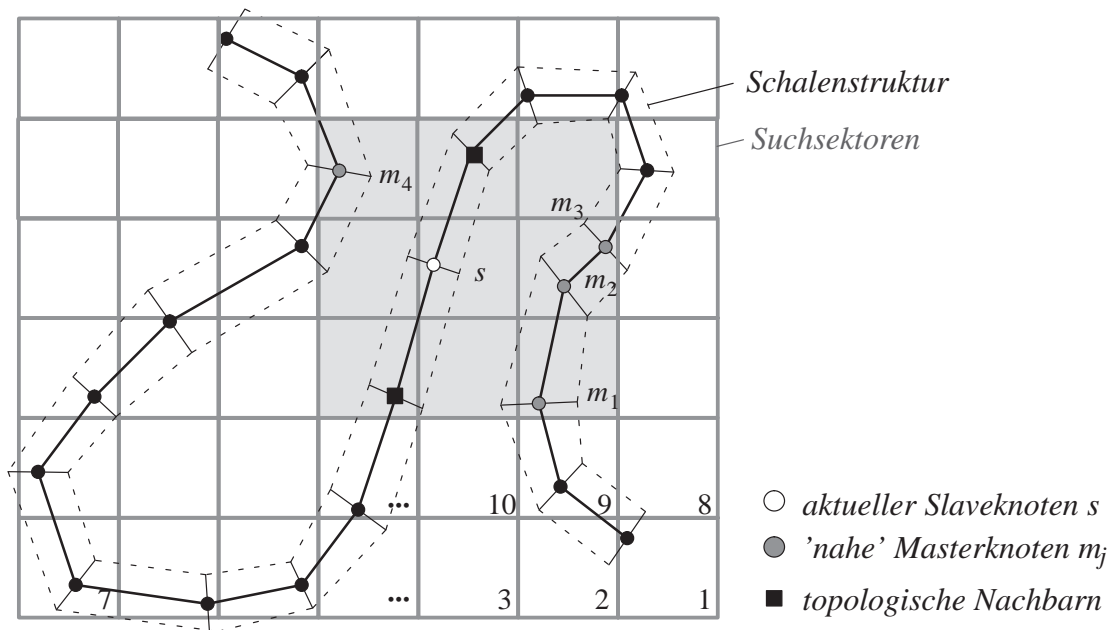


Abb. 7.19: Bucket-Sort Algorithmus (zweidimensionale Darstellung)

Alle Knoten werden nach ihrer Lage in der Momentankonfiguration in ihre jeweiligen Sektoren einsortiert. Dabei 'kennt' sowohl der Knoten seinen Sektor, als auch ein Sektor die momentan in ihm befindlichen Knoten.

Anmerkung: Wenn im Laufe einer Deformation die Struktur den sie umhüllenden Quader verlässt, müssen die Geometrie der Suchsektoren angepasst und die Schalenknoten neu in die Sektoren einsortiert werden.

Da die Sektoren ein kartesisches, strukturiertes Gitter darstellen, sind über die in Abb. 7.19 ange-deutete Indizierung der Sektoren und die Anzahl der Sektoren in jeder räumlichen Richtung auch die Nachbarschaftsbeziehungen unter den Sektoren kostengünstig zu berechnen. Die Gruppe der Masterknoten m_j in enger Nachbarschaft zum Slaveknoten s sind dann alle Knoten, die sich im gleichen Sektor wie s befinden oder in einem angrenzendem Sektor liegen. Von dieser Gruppe der benachbarten Masterknoten werden jedoch topologisch zu s benachbarte Masterknoten ausgeschlossen, da die an diese Knoten anliegenden Elemente keine sinnvollen potentiellen Kontaktsegmente für den Slaveknoten s darstellen. Ist die Gruppe der benachbarten Masterknoten m_j gefunden, so folgt eine Verfeinerung der Kontaktsuche.

7.9.2 Nahester Masterknoten und Übergang auf die Schalenoberflächen

Es erfolgt nun der Übergang von einer reinen Mittelflächenbetrachtung der Schale auf die Schalenoberflächen. Für die Ober- und Unterseite der Schale am Slaveknoten s wird aus der Gruppe der ermittelten Nachbarknoten m_j jeweils derjenige Knoten mit der kürzesten Distanz zwischen den Oberflächen bestimmt.

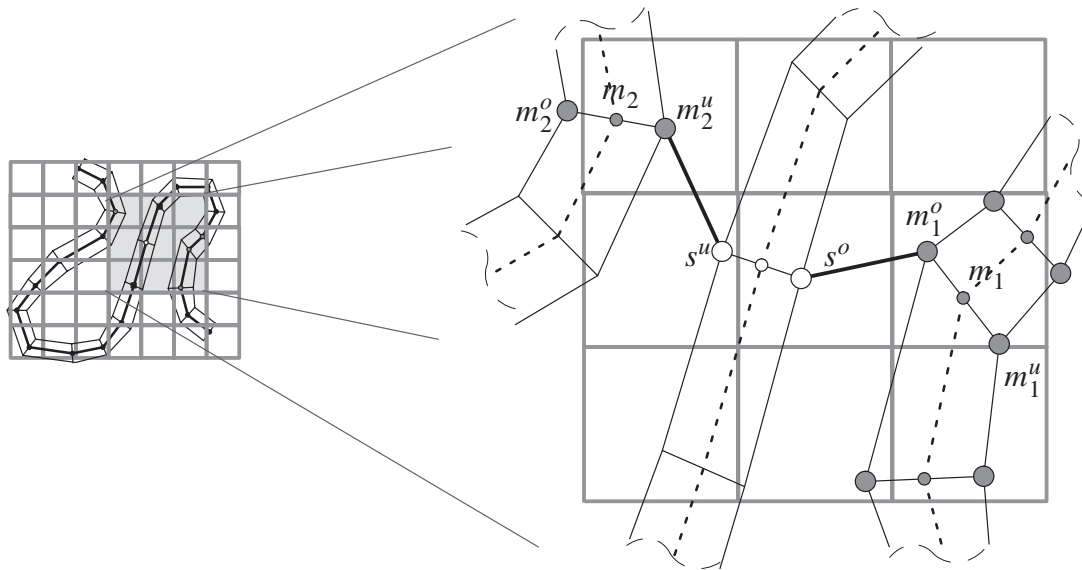


Abb. 7.20: *naheste Nachbarn für Schalenoberflächen eines Slaveknoten s*

In Abb. 7.20 ist dies exemplarisch für die Schalenunterseite am Slaveknoten s^u der Knoten m_2^u , für die Schalenoberseite am Slaveknoten s^o ergibt sich der Knoten m_1^o .

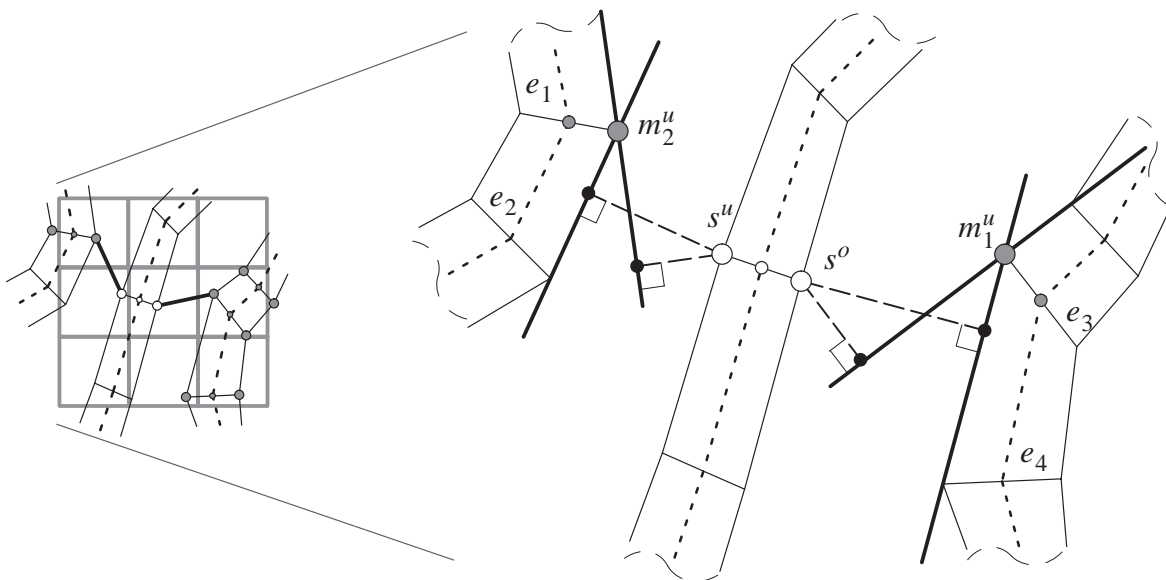


Abb. 7.21: *orthogonale Projektion auf an naheste Nachbarknoten anliegende Elemente*

Anschließend wird eine orthogonale Projektion der Punkte s^u und s^o auf *alle* an ihre nächsten Masterknoten m_2^u und m_1^o angrenzenden Schalenelementoberflächen (Abb. 7.21) vorgenommen. Diese Projektion stellt die letzte Phase der Kontaktsuche dar und ist im folgenden Kapitel 7.9.3 beschrieben. Dabei werden die Elementkoordinaten $\hat{\theta}$ des Projektionspunktes bezüglich des Elementkoordinatensystems θ_e^i bestimmt. Liegt $\hat{\theta}$ innerhalb des Elementes

$$\hat{\theta}^1, \hat{\theta}^2 \in [-1, 1] , \quad (7.68)$$

und ist der zugehörige Betrag der Klaffung $|g|$ nach Gl. (7.67) der kleinste aus allen Projektionen, die Gl. (7.68) erfüllen, so ist das passende Master-Kontaktelement \hat{e} zum Slaveknoten s^u bezie-

ungswise s^o gefunden. Das Ergebnis der Suche ist für das zweidimensionale Beispiel aus den Abbildungen 7.19–7.21 Abb. 7.22 zu entnehmen.

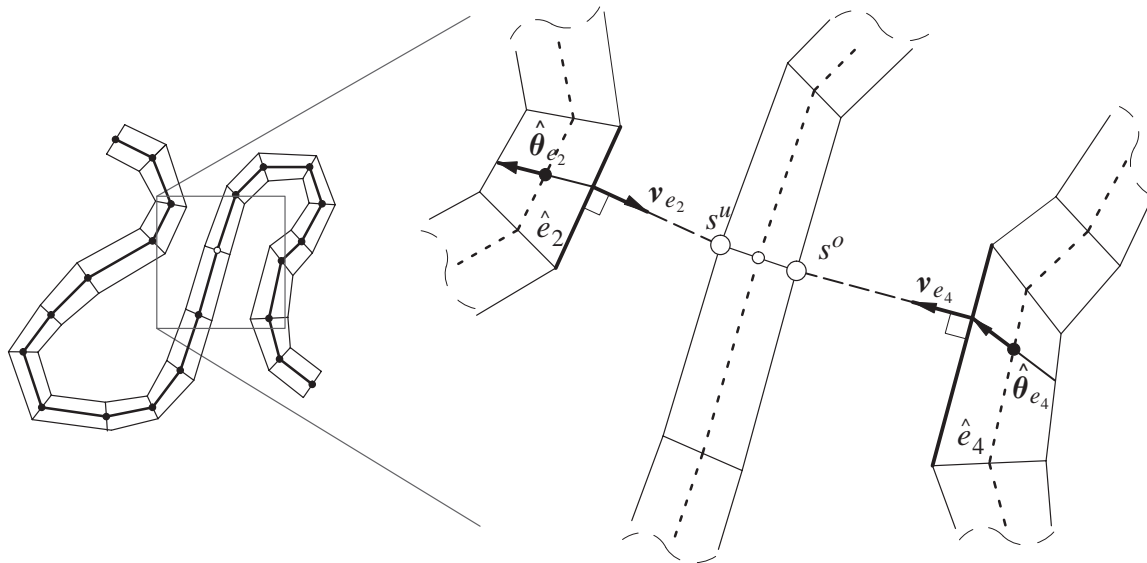


Abb. 7.22: Projektionspunkte und Kontaktsegmente für einen Schalen-Slaveknoten
Diese Ermittlung der Elementkoordinaten $\hat{\theta}$ im Element e aus der orthogonalen Projektion stellt den letzten und aufwendigsten Schritt der Kontaktsuche dar.

7.9.3 Orthogonale Projektion und Lokalkoordinaten des Projektionspunktes

Die Elementkoordinaten $\hat{\theta}$ des Projektionspunktes des Slaveknotens s im Element e ergeben sich nach Abb. 7.17 aus der Orthogonalitätsbedingung für die auswärtsgerichtete Normale $\mathbf{v}(\hat{\theta})$ und den Basisvektoren $\hat{\mathbf{r}}_\alpha(\hat{\theta})$ im Projektionspunkt

$$F_\alpha(\boldsymbol{\theta}) = \underbrace{\left[\left(\bar{\mathbf{r}}_s + \theta^{3[1]} \bar{\mathbf{a}}_{3s} \right) - \sum_{i=1}^4 N_i^{\hat{\theta}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \left(\bar{\mathbf{r}}_m^i + \theta^{3[2]} \bar{\mathbf{a}}_{3m}^i \right) \right]}_{\mathbf{g}(\hat{\boldsymbol{\theta}})} \cdot \bar{\mathbf{r}}_\alpha(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = 0, \quad \theta^{3[1]}, \theta^{3[2]} = 1, -1, \quad (7.69)$$

mit den kovarianten Basisvektoren der Elementoberfläche:

$$\bar{\mathbf{r}}_\alpha(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \sum_{i=1}^4 N_{i,\alpha}^{\hat{\theta}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \left(\bar{\mathbf{r}}_m^i + \theta^{3[2]} \bar{\mathbf{a}}_{3m}^i \right), \quad \theta^{3[2]} = 1, -1. \quad (7.70)$$

Die Werte $\theta^{3[1]}, \theta^{3[2]} = \pm 1$ liegen hier aufgrund der Überlegungen im vorangegangenen Kap. 7.9.2 bereits fest.

Gl. (7.69) stellt für bilineare Ansatzfunktionen N_i ein nichtlineares Gleichungssystem für die Unbekannten $\hat{\theta}^1, \hat{\theta}^2$ dar. Dieses wird am einfachsten mittels einer Newton-Iteration gelöst:

$$\left[\frac{\partial F_\alpha}{\partial \theta^\beta} \right]^k \Delta \boldsymbol{\theta}^k = -\mathbf{F}^k, \quad \boldsymbol{\theta}^{k+1} = \boldsymbol{\theta}^k + \Delta \boldsymbol{\theta}^k, \quad k \leftarrow k + 1. \quad (7.71)$$

Die Linearisierung von $F^k(\theta)$ in Gl. (7.71) ist mit Gl. (7.69) und (7.70) einfach durchzuführen und wird daher nicht explizit angegeben. Als Startwert der Iteration eignet sich der Ursprung des Elementkoordinatensystems. Konvergiert die Iteration gegen ein Wertepaar $\hat{\theta}^1, \hat{\theta}^2 \in [1, -1]$, so liegt der gesuchte Projektionspunkt innerhalb des betrachteten Elements (Abb. 7.22).

7.9.4 Zwei ausgewählte 'pathologische' Fälle der Kontaktsuche

Von den (vielen) in der Kontaktsuche möglichen problematischen geometrischen Konfigurationen sollen zwei herausgegriffen werden, die aus der Schlankheit der betrachteten Schalen resultieren.

Dies ist zum einen die Möglichkeit der 'Durchwanderung' von Körpern innerhalb eines Zeitinkrements (Abb. 7.23).

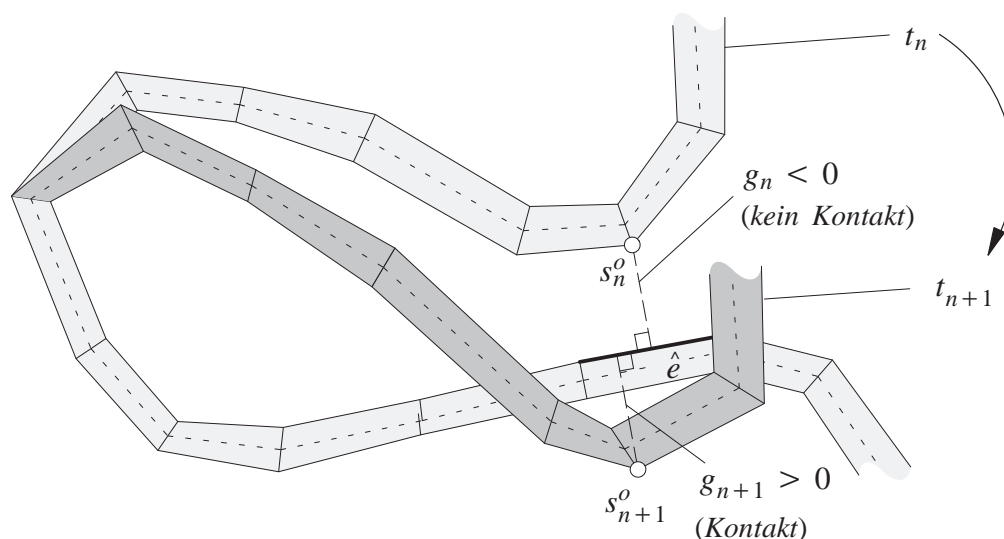


Abb. 7.23: 'Durchwanderung' – Kontaktdetektion über Geschichtsvariablen

Aufgrund der Schlankheit ist es möglich, dass ein (Teil-)Körper innerhalb eines Zeitinkrements eine unzulässige vollständige Durchwanderung eines anderen (Teil-)Körpers vornimmt. Da aufgrund der Kontaktsuche keine Beschränkung der Zeitschrittweite erfolgen soll, so muss eine solche Durchwanderung vom Kontaktsuchalgorithmus bemerkt und verhindert werden können. Da die Lage des Knoten s^o jedoch zu beiden Zeitpunkten t_n und t_{n+1} geometrisch zulässig ist (es liegt keine Penetration vor), kann dies nur durch einen Vergleich der beiden Konfigurationen erfolgen. Dieser wird mit Hilfe von Geschichtsvariablen für die orthogonale Projektion einer jeden Ober- und Unterseite eines Slaveknotens angestellt. Für die in Abb. 7.23 dargestellte Projektion von s_n^o zum Zeitpunkt t_n wird die Klaffung $g_n < 0$ und die aktuelle Projektionsoberfläche des Elementes \hat{e} gespeichert. Die orthogonale Projektion zum Zeitpunkt t_{n+1} kann dann mit derjenigen des letzten Zeitschrittes t_n verglichen werden. Projiziert Slaveknoten s_n^o zur Zeit t_{n+1} 'von der anderen Seite' auf das gleiche Element, so liegt eine Durchwanderung vor. Durch Annahme

einer positiven Klaffung $g_{n+1} > 0$, wie in Abb. 7.23 dargestellt, wird diese dann als Penetration behandelt.

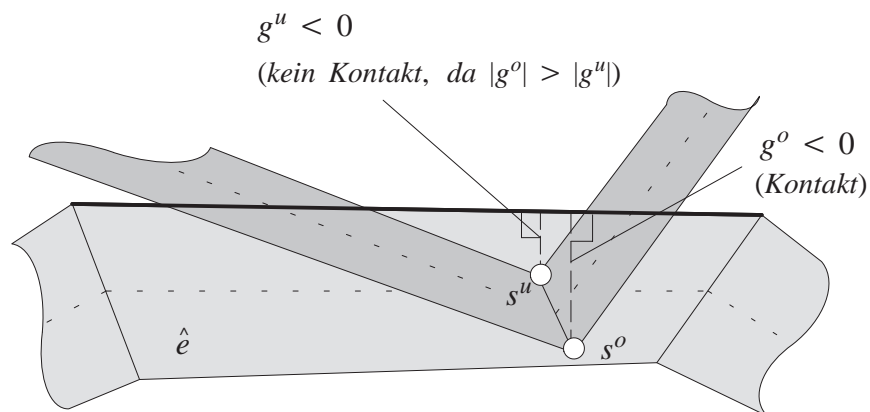


Abb. 7.24: gleichzeitige Penetration der Schalenober- und Unterseite

Eine weitere Problematik, die aus der Schlankheit der Körper resultiert, ist in Abb. 7.24 veranschaulicht. Dringen von einem Slaveknoten sowohl dessen Ober- als auch dessen Unterseite in ein Masterelement \hat{e} ein, so darf nur Kontakt zwischen den einander zugewandten Seiten der beiden Körper angesetzt werden.

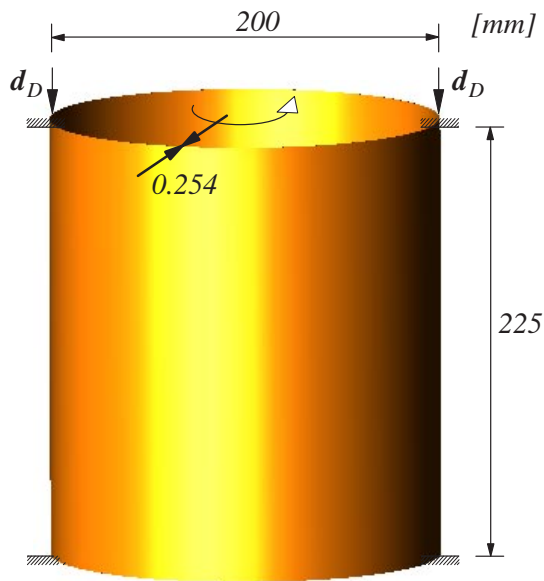
Um diese Konfiguration richtig zu behandeln wird daher das jeweils von s^o und s^u kontaktierte Schalensegment verglichen. Kontaktieren sowohl s^o als auch s^u das gleiche Segment, so wird Kontakt nur für diejenige Seite s^o oder s^u angesetzt, deren Klaffung den größeren Betrag aufweist (In Abb. 7.24 ist dies s^o).

Neben den geschilderten Fällen existieren eine ganz Reihe weiterer geometrischer Konfigurationen, die für die Kontaktentscheidung gesondert behandelt werden müssen, aber nicht unbedingt aus der Schlankheit der Körper resultieren. Für weitere Ausführungen zur Kontaktsuche sei daher auf Laursen (2002) und Benson und Hallquist (1990) verwiesen.

7.10 Beispiele

7.10.1 Beulen eines axial gestauchten Kreiszylinders mit Selbstkontakt

Das Beispiel geht auf Versuche mit axial gestauchten Kreiszylindern von Esslinger und Geiger (1975) zurück. Es handelt sich um den in Abb. 7.25 dargestellten Zylinder aus Mylarfolie[®], der in einer dynamischen Simulation durch eine linear gesteigerte Verschiebungsvorgabe des oberen Zylinderrandes zusammengedrückt wird. Der Zylinder ist an beiden Enden eingespannt, die Dickenänderung der Schale an der Stelle der Einspannung ist jedoch nicht gehalten. Die Rechnung wurde mit 2100 bilinearen hybriden Schalenelementen durchgeführt.



Material : Neo – Hooke

$$E = 3.0 \cdot 10^3 \frac{N}{mm^2}$$

$$\nu = 0.3$$

$$\rho = 1.4 \frac{g}{cm^3}$$

Belastung :

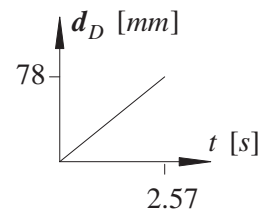


Abb. 7.25: Geometrie, Material und Belastung

Für den Kontakt wurde die Reibung vernachlässigt, es wurde eine Augmented–Lagrange–Regularisierung eingesetzt, die mit drei Iterationen des Uzawa–Algorithmus (Kap. 7.8 und Anhang A4.2) keine nennenswerten Überlappungen des Körpers ergab.

Aufgrund des hochdynamischen Einspringens und Wechsels der Beulmoden war eine wiederholte Zeitschrittweitenanpassung notwendig. Abb. 7.26 zeigt Momentaufnahmen aus der Deformationsgeschichte. Deutlich erkennbar ist der Wechsel zwischen unterschiedlichen Beulmoden und der Selbstkontakt der Beulen bei zunehmender Deformation. Die in Abb. 7.26 teilweise erkennbaren scharfen Kanten in der Struktur sind auf die doch verhältnismäßig grobe Diskretisierung zurückzuführen.

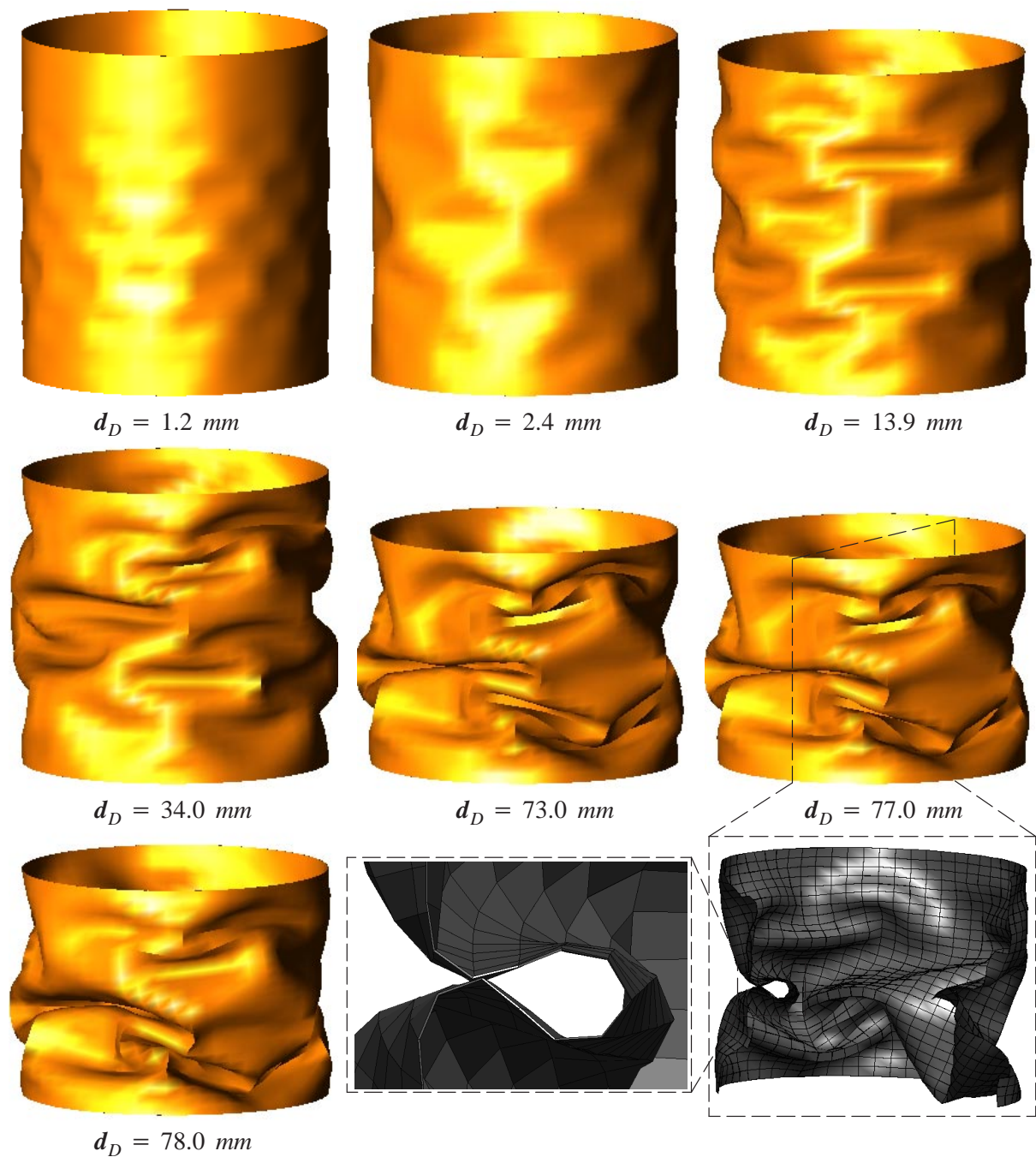
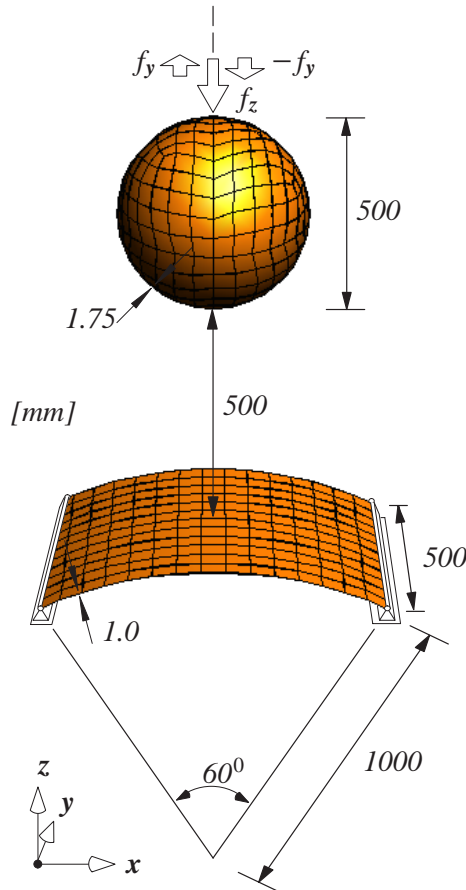


Abb. 7.26: Deformation und Selbstkontakt

7.10.2 Aufprall einer Kugel auf ein Kreiszylindersegment

Das zweite Beispiel zeigt den Aufprall einer Hohlkugel auf ein Kreiszylindersegment. Die Geometrie, Randbedingungen und Belastung sind in Abb. 7.27 dargestellt, es wurde für beide Körper ein hyperelastisches Ogden-Materialgesetz (Ogden (1984), Holzapfel (2000)) verwendet. Die Hohlkugel wird durch eine Flächenlast f_z auf ihrer gesamten Schalenmittelfläche in Richtung des Kreiszylindersegments beschleunigt. Zwei einander entgegengerichtete Flächenlasten f_y ,

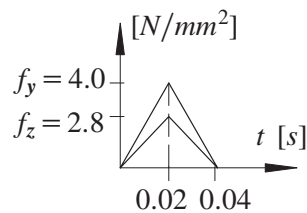
– f_y auf den beiden Kugelhälften verursachen eine Rotation der Kugel um die z -Achse im Kugelschwerpunkt. Alle Lasten werden als kurzer Impuls vor dem Kontakt aufgebracht, die Belastungsgeschichte ist in Abb. 7.27 angegeben. Das Zylindersegment ist entlang seiner nicht gekrümmten Ränder in z -Richtung gehalten und in der x - y -Ebene verschieblich.



kompressibles Ogden Material :

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1.3 & \mu_1 &= 6.3 \cdot 10^{-1} \text{ N/mm}^2 \\ \alpha_2 &= 5.0 & \mu_2 &= 1.2 \cdot 10^{-3} \text{ N/mm}^2 \\ \alpha_3 &= -2.0 & \mu_3 &= -0.1 \cdot 10^{-1} \text{ N/mm}^2 \\ \nu &= 0.49 & \rho &= 5 \cdot 10^{-6} \text{ kg/mm}^3 \end{aligned}$$

Belastung :



Kontakt :

*Augmented – Lagrange – Regularisierung
mit 3 Iterationen des Uzawa Algorithmus,
Reibungskoeffizient $\mu = 0.8$*

Abb. 7.27: Geometrie, Material und Belastung

Beim Auftreffen der Kugel verformt sich in erster Linie das 'weichere' Zylindersegment. Abb. 7.28 zeigt Momentaufnahmen der Deformation. Das Zylindersegment 'schmiegt' sich dabei an die Kugel an und wird infolge der Reibung mit der aufgrund der Lasten f_y um die z -Achse rotierenden Kugel leicht um die z -Achse verdreht. Die Augmented–Lagrange–Regularisierung des Kontakts mit 3 Iterationen des Uzawa–Algorithmus zur Bestimmung der Lagrange–Multiplikatoren garantiert auch hier die hinreichend genaue Erfüllung der Kontakt–Inpenetrabilitätsbedingung, so dass es trotz der hohen Schlankheit von Kugel und Zylindersegment nicht zu unerlaubten Durchdringungen der Körperoberflächen kommt.

Die in Kap. 7.9 skizzierte Kontaktsuche ermittelte alle Kontakte trotz der großen Verschiebungen und der unstrukturierten Diskretisierung der Kugel zuverlässig. Die die Gesamtstruktur umhüllenden Suchsektoren des Bucket–Sort–Algorithmus aus Kap. 7.9.1 werden adaptiv der aktuellen Geometrie des Problems angepasst, sobald die deformierte Struktur nicht mehr vollständig innerhalb der Sektoren liegt.

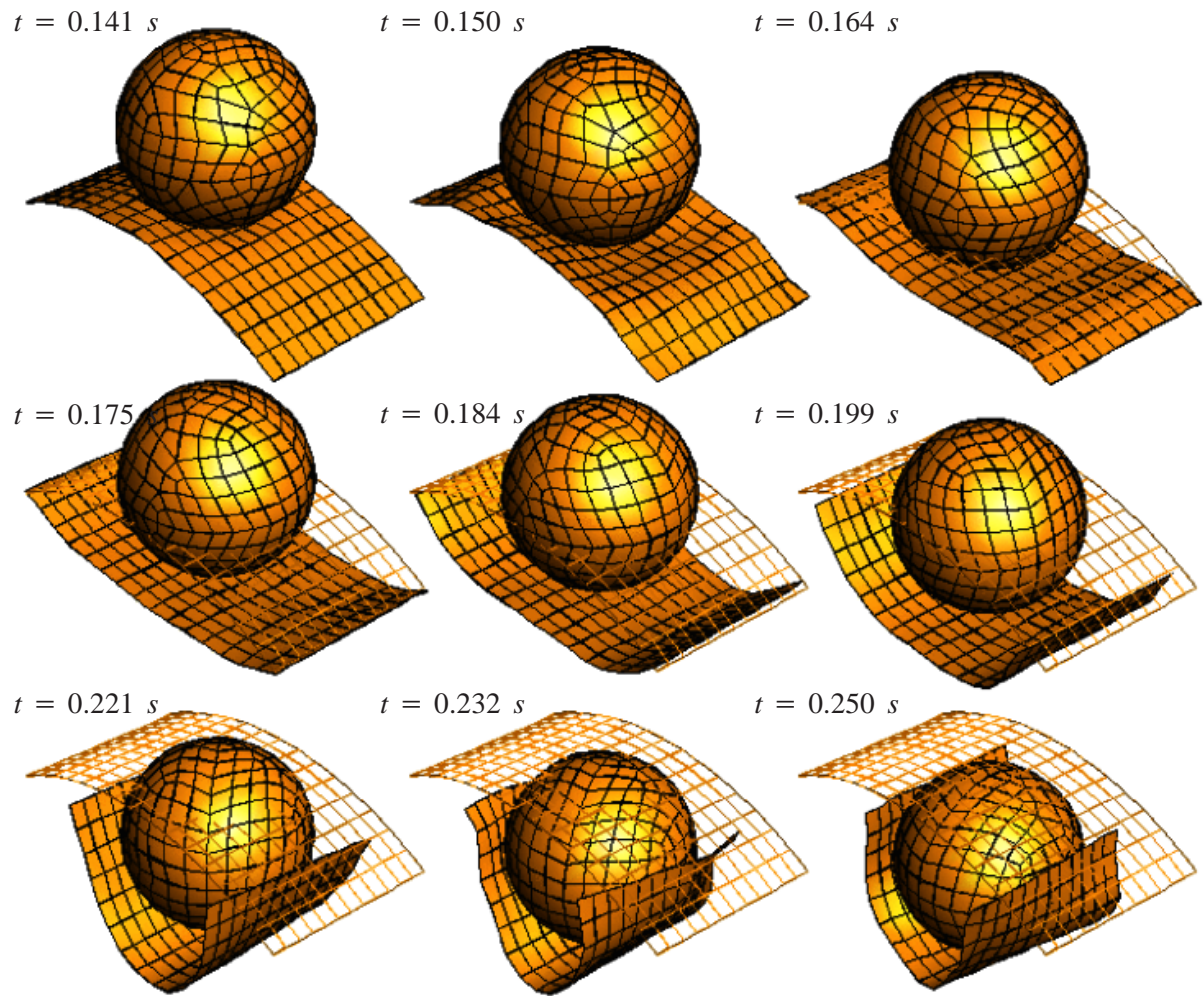


Abb. 7.28: Momentaufnahmen der Deformation

8 Zusammenfassung und Ausblick

Das im Rahmen dieser Arbeit entstandene Konzept zum Simulationsprogramm CCARAT ist eine Umgebung zur Behandlung von volumen- und oberflächengekoppelten Mehrfeldproblemen auf Parallelrechnern. Verteilte Datenstrukturen sowie parallele Algorithmen, wie beispielsweise parallele Löser für lineare Gleichungssysteme, sind dabei in einem Gesamtkonzept auf der Basis von Gebietszerlegungsmethoden integriert. Dieser 'grobgranulare' Parallelisierungsansatz gewährleistet die Anwendbarkeit des Programms auch auf Parallelrechnern mit verteiltem Arbeitsspeicher.

Die im sequentiellen Vorgängerprogramm CARAT vorhandenen Finite-Element-Implementierungen für diverse Typen von Struktur- und Fluid-Elementen sowie Methoden zur Pfadverfolgung, Zeitintegration und Fluid-Struktur-Interaktion wurden dann von der Forschergruppe am Institut für Baustatik in die neue parallele Umgebung übersetzt.

Für sehr große Probleme und den Einsatz von Parallelrechnern eignen sich iterative Methoden zur wiederholten Lösung der resultierenden linearen Gleichungssysteme aufgrund ihrer Parallelisierungseigenschaften, des Rechenaufwandes und der Speicherkosten besser als direkte Lösungsmethoden.

Dabei stellt die in dieser Arbeit schwerpunktmäßig betrachtete dreidimensionale 7-Parameter-Schalenformulierung nach Büchter und Ramm (1992) besondere Herausforderungen in dem Sinne, dass die resultierenden (effektiven) Steifigkeitsmatrizen sehr schlecht konditioniert sind. Dies hat bekanntermaßen Auswirkungen auf die Effizienz und Anwendbarkeit iterativer Löser. Es wird gezeigt, dass die schlechte Konditionierung zum Teil eine Folge der Schlankheit von Schalenstrukturen ist und daher unabhängig von der Wahl der Formulierung auftritt. Bei der erwähnten dreidimensionalen Schalenformulierung tritt infolge der (ansonsten sehr vorteilhaften) Parametrisierung von Rotationen über Differenzverschiebungen und die Berücksichtigung der Dickenänderung in der Schalenkinematik eine zusätzliche Abhängigkeit der Konditionierung von der Schlankheit auf, die diese drastisch weiter verschlechtert.

Durch die Einführung eines Skalierungsfaktors für die Schalendicke (Skalierter Direktor Ansatz (SDC)) konnte diese zusätzliche schlechte Konditionierung der 7-Parameter-Schalenformulierung gegenüber einer Formulierung mit Rotationsfreiheitsgraden und ohne Dickenänderung behoben werden. Dabei ist diese Skalierung der Schalendicke neutraler Natur und nimmt auch bei Anwendung von Zeitintegrationsverfahren, der Berücksichtigung großer Deformationen sowie der Anwendung hybrider Elementformulierungen auf der Basis der EAS- und ANS-Methode (Simo und Rifai (1990a), Bathe und Dvorkin (1985)) keinen Einfluss auf die Ergebnisse. Die Skalierung führt bei vernachlässigbar kleinen numerischen Kosten zu einem deutlich beschleunigten Konvergenzverhalten bei der iterativen Lösung der resultierenden Gleichungssysteme.

Der Skalierungsfaktor des SDC–Ansatzes ist im Rahmen dieser Arbeit für die Gesamtstruktur konstant gehalten. Um die Anwendbarkeit des Ansatzes auf Strukturen mit variierender Dicke und/oder Diskretisierungen mit stark unterschiedlicher Netzdichte zu verbessern, wäre es wünschenswert, die Skalierung als räumlich veränderliche Feldgröße einzuführen. Die Einbettung des Skalierungsfaktors in die zugrundeliegende Schalenformulierung müsste hierzu entsprechend angepasst werden.

Der Gedanke der Reparametrisierung des Verschiebungsfeldes lässt sich auch auf andere Arten der Diskretisierung übertragen. Wie in Kap 5, Abb. 5.4 gezeigt, zeigen Diskretisierungen schlanker Strukturen mit Kontinuumelementen die gleiche nachteilige Abhängigkeit der Konditionierung von der Strukturschlankheit wie eine Schalenformulierung mit Differenzfreiheitsgraden. Wird ein dünnwandiger Körper mit beispielsweise trilinearen Kontinuumelementen diskretisiert, so lässt sich anhand der Elementgeometrie die Schlankheit und damit die 'Dickenrichtung' leicht feststellen. Über eine rein algorithmische Modifikation der Knotenkoordinaten und damit der Elementgeometrie kann das Verschiebungsfeld analog zum Vorgehen für die 7–Parameter–Schalenformulierung in Kap 5 reparametrisiert und somit auch in diesem Fall eine Verbesserung der Konditionierung der resultierenden Gleichungssysteme erzielt werden

Die Anwendung des Skalierter–Direktor–Ansatzes allein genügt jedoch zur effizienten iterativen Gleichungslösung von Schalenproblemen nicht. Er wird daher mit einer Multigrid–Vorkonditionierung kombiniert, die speziell langwellige, niedrig–energetische Fehleranteile im Lösungsprozess eliminiert. Die hierzu angewendete Smoothed Aggregation Multigrid–Methode (Vanek, Mandel und Brezina (1996), (1999) und (2001)) erlaubt die Konstruktion von Prolongationen und Restriktionen zwischen Leveln auf der Basis der Feinlevelsystemmatrix und der Feinleveldiskretisierung. Die aufwändige Generierung von Grobdiskretisierungen kann dadurch entfallen. Knotenblöcke (mit bis zu sechs Schalenfreiheitsgraden) der Feinlevelsystemmatrix werden zu disjunkten, sogenannten Aggregaten zusammengefasst, die wiederum auf dem nächst–größeren Level durch einen Knotenblock mit sechs Freiheitsgraden repräsentiert werden. Die benötigten Prolongationsmatrizen auf allen Leveln werden so konstruiert, dass ihr Bildbereich die (theoretischen) Starrkörpermoden der Struktur und somit die problematischen niedrigst–energetischen Lösungsanteile enthält. Die Notwendigkeit einer zusätzlichen Glättung der Prolongationen wird anschaulich an einem Modellproblem erläutert sowie der Effekt der Smoothed Aggregation Multigrid–Vorkonditionierung anhand von Schalenbeispielen demonstriert. Wie in Kap. 6.7 bereits ausgeführt, ist die Ergänzung des in dieser Arbeit dargestellten Ansatzes um einige weitere Punkte wünschenswert. Bei der Bildung der Aggregate ist die Berücksichtigung von Anisotropien infolge anisotropen Materialverhaltens und geometrisch nichtlinearer Effekte (Beulen) empfehlenswert. Die Anwendung paralleler, knotenblockorientierter Glättungsalgorithmen wie Mehrfarben–Block–Gauss–Seidel, die Variation der Überlappungsbreiten der Additiv–Schwarzschen Gebietszerlegung sowie das Zusammenfassen mehrerer Teilgebiete zu grö-

ßeren Einheiten auf den größeren Leveln bieten Potential zur weiteren Effizienzsteigerung. Die (unaufwendige) Erweiterung der hier auf die 7-Parameter-Schalenformulierung beschränkten Ermittlung der Starrkörpermoden auf andere Diskretisierungsarten und Diskretisierungen mit gemischten Elementtypen erweitert die Einsatzmöglichkeiten des hier gezeigten Multilevel-Ansatzes. Möglicher Gegenstand zukünftiger Forschung ist ferner die adaptive Anpassung der Multilevel-Lösung der linearen Gleichungssysteme aufgrund von Informationen, die der Newton-Iteration des Gleichgewichts, der verwendeten Pfadverfolgung oder Zeitintegration entnommen werden können. Eine adaptive Wiederverwendung der Groblevel-Systemmatrizen in aufeinanderfolgenden Lösungen, die adaptive Qualitätsanpassung des Transfers zwischen Leveln und der eingesetzten Glättungsalgorithmen und die Variation der Levelanzahl sind hier denkbar. Eine Kombination oder Erweiterung des Smoothed Aggregation Multigrid um die in den Kapiteln 6.7.1 bis 6.7.3 kurz diskutierten Ansätze und Methoden sind weitere vielversprechende Entwicklungsmöglichkeiten.

Es wurde ferner eine Kontaktdiskretisierung für die 7-Parameter-Schalenformulierung vorgestellt. Sie basiert auf einer kontinuumsmechanischen Kontaktformulierung für große Deformationen unter Berücksichtigung von Reibung von Laursen (1992) und (2002), bei der eine Linearisierung der kinematischen Kontaktgrößen im kontinuierlichen Rahmen gegeben wird, und die daher für eine Übertragung auf diverse Arten von Diskretisierungen sehr geeignet ist. Lediglich die Linearisierung der Reibkräfte muss zur Bestimmung der Reibsteifigkeiten nach Einführung einer backward-Euler-Zeitintegration für das verwendete Coulombsche Reibgesetz erfolgen. Die in der Schalenkinematik enthaltene Dickenänderung ist dabei eine Notwendigkeit zur Diskretisierung von Kontaktbedingungen für die Schalenoberflächen. Die mittelflächenorientierte Beschreibung der Schalengeometrie und -deformation erfordert die ebenfalls mittelflächenorientierte Beschreibung der Kontaktkinematik für die Schalenoberflächen. Eine einfache Möglichkeit der Realisierung des beliebigen Kontakts zwischen Schalenober- und Unterseiten mittels einer Fallunterscheidungsmatrix und der Semidiskretisierung des Schalenkörpers in Dickenrichtung wird dazu eingeführt. Die (restliche) räumliche Diskretisierung erfolgt dann mit einem Knoten-Segment-Ansatz mit bilinearer Interpolation der Kontaktoberflächen und einer Knotenpunktintegration (nodal quadrature) der virtuellen Kontaktarbeit. Dieser Ansatz liefert eine gute globale Lösung, ergibt jedoch aufgrund der nur C^0 -kontinuierlichen Interpolation der Kontaktflächen eine recht ungenaue Approximation der Kontaktpressungsverteilung in der Kontaktfuge. Für Anwendungen, bei denen der Glattheit der in Kontakt befindlichen Oberflächen eine besondere Bedeutung zukommt (beispielsweise Walzprozesse oder einige Anwendungen der Umformtechnik), ist eine Erweiterung auf eine C^1 -kontinuierliche Kontaktdiskretisierung (Wriggers (2002)) empfehlenswert. Solch eine 'glatte' Kontaktformulierung kann auch auf der Basis von Mortar-Methoden erfolgen, bei denen die geometrische Inpenetrabilitätsbedingung in schwacher Form erfüllt wird. Für dreidimensionale Probleme bei Berücksichtigung gro-

ßer Deformationen ist dies Gegenstand aktueller Forschungen (McDevitt und Laursen (2000), Puso und Laursen (2003)).

Für die Kontaktsuchalgorithmen wird vorteilhaft von der Annahme der Schlankheit der betrachteten Körper und der mittelflächenorientierten Geometriebeschreibung der Momentankonfiguration Gebrauch gemacht.

Die Suche nach allen auftretenden Kontakten ist in mehrere Phasen aufgliedert, wobei zunächst eine grobe Vorauswahl möglicher Kontaktpaarungen mittels eines Bucket–Sort–Algorithmus nach Benson und Hallquist (1990) vorgenommen wird. In dieser Phase genügt aufgrund der Schlankheit der Körper die Betrachtung der Mittelfläche anstatt der Oberflächen. Nachdem so eine starke Einschränkung möglicher Kontaktpaarungen erzielt ist, folgt in der darauffolgenden feineren und aufwändigeren Suchphase der Übergang auf die beiden Schalenoberflächen. Die Ermittlung der Kontaktklaffungen und etwaigen unzulässigen Durchdringungen von Oberflächen muss somit nur für eine bereits stark eingeschränkte Anzahl an Möglichkeiten vorgenommen werden. Hierzu wird eine orthogonale Projektion eines potentiell kontaktierenden (Oberflächen–)Knotens auf eine Schalenelementoberfläche vorgenommen. Dabei ist die Ermittlung des Projektionspunktes in den Lokalkoordinaten der Mittelfläche des Schalenelementes erforderlich. Die Projektion führt auf ein nichtlineares Gleichungssystem für die Lokalkoordinaten des Projektionspunktes, das mit einer Newton–Iteration und der hierzu nötigen Linearisierung der Orthogonalitätsbedingung der Projektion gelöst wird.

Aus der Schlankheit der Körper resultieren jedoch auch problematische geometrische Konfigurationen für die Kontaktsuche, wie beispielsweise die Möglichkeit der vollständigen Durchwanderung eines Schalenkörpers durch einen anderen innerhalb eines Zeitinkrements. Soll aus der Kontaktsuche keine zusätzliche Einschränkung der verwendeten Zeitschrittweite resultieren, so können zur Detektion solcher Fälle Geschichtsvariablen der Kontaktsuche eingeführt werden, die einen Vergleich der Momentankonfiguration mit derjenigen des letzten Zeitschritts erlauben. Mit diesem Vergleich lassen sich mit hoher Zuverlässigkeit Durchwanderungen und einige weitere problematische Konfigurationen detektieren und richtig behandeln. Kontakt und Selbstkontakt von Schalenoberflächen bei Berücksichtigung von Reibung wird abschließend anhand zweier Beispiele, bei denen schlanke Strukturen große Deformationen erfahren, demonstriert.

Literatur

- Adams, M.F. (1998):** Multigrid Equations Solvers for Large Scale Nonlinear Finite Element Simulations. *Ph.D. Thesis, Technical report UCB//CSD-99-1033, University of California, Berkeley, USA.*
- Adams, M.F. (2000):** Parallel multigrid solvers for 3D unstructured finite element problems in large deformation elasticity and plasticity, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **48**, 1241–1262.
- Adams, M.F. (2002):** Evaluation of three unstructured multigrid methods on 3D finite element problems in solid mechanics, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **55**, 519–534.
- Alefeld, G., Lenhardt, I., Rottner, T., Schweizerhof, K. (1997):** Verbesserung und Beschleunigung von Lösungsverfahren für Versagensanalysen in der Strukturmechanik. *BMBF-Schlußbericht 01R416A3, Institut für Angewandte Mathematik und Institut für Mechanik, Universität Karlsruhe, Deutschland.*
- Amdahl, G. (1967):**, Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large-Scale Computing Capabilities, in: *Proceedings of AFIPS Conference Volume 30, AFIPS Press, Atlantic City, USA.*
- Amero, F., Petöcz, E. (1998):** Formulation and Analysis of Conserving Algorithms for Dynamic Frictionless Contact/Impact Problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **158**, 269–300.
- Armero, F., Romero, I. (1999):** Dissipative Integration Algorithms for Nonlinear Elastodynamics, in: *Wunderlich, W. (Editor): Proceedings of the European Conference on Computational Mechanics 1999, 31. 8. – 3.9.1999, München, Deutschland.*
- Amestoy, P.R., Duff, I.S., L'Excellent, J.-Y. (2000):** Multifrontal Parallel Distributed Symmetric and Unsymmetric Solvers, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **148**, 501–520.
- Amestoy, P.R., Duff, I.S., L'Excellent, J.-Y., Koster, J. (2001):** A Fully Asynchronous Multifrontal Solver Using Distributed Dynamic Scheduling, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, **23**, 15–41.
- Amestoy, P.R., Duff, I.S., L'Excellent, J.-Y., Koster, J. (2003):** MULTIFRONTAL MASSIVELY PARALLEL SOLVER (MUMPS Version 4.3), Users' guide, *Laboratoire Informatique et Mathématiques Appliquées, Ecole Nationale Supérieure d'Electrotechnique, d'Electronique, d'Informatique, d'Hydraulique et des Télécommunications, Toulouse, Frankreich, erhältlich unter <http://www.enseiht.fr/lima/apo/MUMPS/>.*
- Ashcraft, C.C., Grimes, R.G., Pierce, D.J., Wah, D.K. (1999):** The User Manual for SPOOLES: Release 2.2: An Object Oriented Software Library For Solving Sparse Linear Systems of Equations. *Boeing Shared Services Group, Seattle, USA, erhältlich unter <http://www.netlib.org/linalg/spooles/spooles.2.2.html>.*
- Axelsson, O. (1994):** Iterative Solution Methods. *Cambridge University Press, Cambridge, UK.*
- Barrett, R., Berry, M., Chan, T.F., Demmel, J., Donato, J.M., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C., van der Vorst, H.A. (2002):** Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods. *SIAM Press, Philadelphia, USA, erhältlich unter http://www.netlib.org/linalg/html_templates/Templates.html.*
- Basar, Y., Krätzig, W.B. (1985):** Mechanik der Flächentragwerke. *Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, Deutschland.*
- Bathe, K.J., Dvorkin, E.N. (1985):** A Four-Node Plate bending Element Based on Mindlin/Reissner Theory and a Mixed Interpolation, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **21**, 367–383.
- Bathe, K.J. (2002):** Finite-Elemente-Methoden, 2. Auflage. *Springer-Verlag, Berlin, Deutschland.*
- Benson, D.J., Hallquist, J.O. (1990):** A Single Surface Contact algorithm for the Post-Buckling Analysis of Shell Structures, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **78** 141–163.
- Benvenuto, E. (1991):** An Introduction to the History of Structural Mechanics, Part II: Vaulted Structures and Elastic Systems. *Springer-Verlag, New York, USA.*
- Benzi, M. (1993):** A Direct Row-Projection Method for Sparse Linear Systems. *PhD-Thesis, Department of Mathematics. North Carolina State University, USA.*

- Benzi, M., Tuma, M. (1999):** A comparative study of sparse approximate inverse preconditioners, *Applied Numerical Mathematics*, **30**, 305–340.
- Bischoff, M., Ramm, E. (1997):** Shear Deformable Shell Elements for Large Strains and Rotations, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **40**, 4427–4449.
- Bischoff, M., Ramm, E. (2000):** On the Physical Significance of Higher Order Kinematic and Static Variables in a Three–Dimensional Shell Formulation, *International Journal of Solids and Structures*, **37**, 6933–6960.
- Bischoff, M. (1999):** Theorie und Numerik einer dreidimensionalen Schalenformulierung. *Dissertation, Bericht Nr. 30, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Braess, D. (1995):** Towards algebraic multigrid for elliptic problems of second order, *Computing*, **55**, 379–393.
- Bramble, J.H., Pasciak, J.E., Xu, J. (1990):** Parallele Multilevel Preconditioners, *Mathematics of Computation*, **55**, 1–22.
- Bramble, J.H. (1994):** Multigrid Methods. *Pitman Research Notes in Mathematics Series, Nr. 294.*
- Brandt, A., McCormick, S.E., Ruge, J. (1982):** Algebraic Multigrid (AMG) for Automatic Multigrid Solution with Applications to Geodetic Computations, *Report, Institute for Computational Studies, POB 1852, Fort Collins, Colorado, USA.*
- Braun, M. (1995):** Nichtlineare Analysen von geschichteten, elastischen Flächentragwerken. *Dissertation, Bericht Nr. 19, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Brezina, M. (1997a):** Robust Iterative Methods on Unstructured Meshes. *Ph.D. Thesis, University of Colorado at Denver, Colorado, USA.*
- Brezina, M., Vanek, P. (1997b):** One Black Box Iterative Solver. *Technical Report 106, Center for Computational Mathematics, University of Colorado at Denver, USA.*
- Briggs, W.L., Henson, V.E., McCormick, S.F. (2000):** A Multigrid Tutorial, Second Edition. *Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, USA.*
- Büchter, N. (1992):** Zusammenführung von Degenerationskonzept und Schalentheorie bei endlichen Rotationen. *Dissertation, Bericht Nr. 14, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Büchter, N., Ramm, E. (1992):** 3d–Extension of Nonlinear shell Equations Based on the Enhanced Assumed Strain Concept, in: *Hirsch, C. (Editor): Computational Methods in Applied Sciences, Elsevier Press.*
- Büchter, N., Ramm, E., Roehl, D. (1994):** Three–Dimensional Extension of Nonlinear Shell Formulation Based on the Enhanced Assumed Strain Concept, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **37**, 2551–2568.
- CIMNE (2003):** GID Reference Manual 7. *International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), <http://gid.cimne.com>, Barcelona, Spanien.*
- Chow, E. (1997):** Robust Preconditioning for Sparse Linear Systems. *PhD–Dissertation, University of Minnesota, USA.*
- Chung, J., Hulbert, G.M. (1993):** A time integration algorithm for structural dynamics with improved numerical dissipation: The Generalized– α method, *Journal of Applied Mechanics*, **60**, 371–375.
- Crisfield, M. (1997):** Non–linear Finite Element Analysis of Solids and Structures, Vol II. *John Wiley & Sons, Chichester, UK.*
- Douglas, C.C., Haase, G., Langer, U. (2003):** A Tutorial on Elliptic PDE Solvers and Their Parallelization. *Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, USA.*
- Dracopoulos, M.C., Crisfield, M.A. (1995):** Coarse/fine mesh preconditioners for the iterative solution of finite element problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **48**, 3297–3313.
- Dryja, M., Widlund, O.B. (1987):** An Additive Variant of the Schwarz Alternating Method for the Case of Many Subregions. *Technical Report 339 und Ultracomputer Note 131, Department of Computer Science, Courant Institute, University of New York, New York, USA.*
- Dryja, M., Widlund, O.B. (1991):** Multilevel additive methods for elliptic finite element problems, in: *Hackbusch, W. (Editor): Parallel Algorithms for Partial Differential Equations, Proceedings of the Sixth GAMM Seminar, Kiel 1990, Vieweg, Braunschweig, Deutschland.*

- Dryja, M., Widlund, O.B. (1994):** Domain decomposition algorithms with small overlap, *Siam Journal on Scientific Computing*, **15**, 604–620.
- Duff, I.S., van der Vorst, H.A. (1999):** Developments and trends in the parallel solution of linear systems, *Parallel Computing*, **25**, 1931–1970.
- van Duin, A.C.N. (1998):** Parallel Sparse Matrix Computations. *PhD Thesis, Rijksuniversiteit Leiden, Nederlande.*
- Eberhard, P. (2000):** Kontaktuntersuchungen durch hybride Mehrkörpersystem / Finite Elemente Simulationen. *Habilitationsschrift, Shaker Verlag, Aachen, Deutschland.*
- El Amin, H. (2003):** Three Dimensional Fragmentation Simulation. *Master Thesis, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Esslinger, M., Geiger, B. (1975):** Überblick über das Beul- und Nachbeulverhalten von dünnwandigen Kreiszyklindern, in: *Esslinger, M. (Editor): Beulen von Schalen, Beiträge zur Schalenbeultagung in Braunschweig, Juni 1975, Sonderheft der Deutschen Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft- und Raumfahrt e.V.*
- Fedorenko, R.P. (1964):** The speed of convergence of one iterative process, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **4**, 227–235.
- Ferencz, R.M., Hughes, T.J.R (1998):** Iterative Finite Element Solutions in Nonlinear Solid Mechanics, in: *Ciarlet, P.G., Lions, J.L. (Editoren): Handbook of Numerical Analysis, Vol. VI: Numerical Methods for Solids (Part 3), North-Holland, Amsterdam, Nederlande.*
- Fish, J., Pandheeradi, M., Belsky, V. (1995):** An efficient multilevel solution scheme for large scale non-linear systems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **38**, 1597–1610.
- Fish, J., Belsky, V., Gomma, S. (1996):** Unstructured multigrid method for shells, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **39**, 1181–1197.
- Fish, J., Belsky, V. (1997):** Generalized Aggregation Multilevel Solver, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **40**, 4341–4361.
- Fragakis, Y., Papadrakakis, M. (2003):** The mosaic of high performance domain Decomposition Methods for Structural Mechanics: Formulation, interrelation and numerical efficiency of primal and dual methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **192**, 3799–3830.
- Freund, W.R. Gutknecht, M.H., Nachtigal, N.M. (1993):** An Implementation of the Look-Ahead Lanczos Algorithm for Non-Hermitian Matrices, *SIAM Journal on Scientific Computing*, **14**, 137–158.
- Gee, M., Ramm, E., Wall, W.A. (2004):** Parallel Multilevel Solution of Nonlinear Shell Structures, *Zur Veröffentlichung angenommen bei Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.*
- Giannakopoulos, A.E. (1989):** The return mapping method for the integration of friction constitutive relations, *Computers and Structures*, **32**, 157–167.
- Go, S. (1999):** Multilevel Methods on Unstructured Grids. *PhD Thesis, University of California, Los Angeles, USA.*
- Golub, G.H., Van Loan, C.F. (1986):** Matrix Computations. *North Oxford Academic Publishing, London, UK.*
- Hackbusch, W. (1976):** Ein iteratives Verfahren zur schnellen Auflösung elliptischer Randwertprobleme. *Report 76-12, Universität Köln, Deutschland.*
- Hackbusch, W. (1985):** Multi-Grid Methods and Applications. *Springer-Verlag, Heidelberg, Deutschland.*
- Hackbusch, W. (1993):** Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme. *B.G. Teubner, Stuttgart, Deutschland.*
- Haufe, A. (2001):** Dreidimensionale Simulation bewehrter Flächentragwerke aus Beton mit der Plastizitätstheorie. *Dissertation, Bericht Nr. 33, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Hestenes, M.R., Stiefel, E.L. (1952):** Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *National Bureau of Standards' (NBS) Journal of Research, Section B*, **49**, 409–436.

- Hörmann, M. (2002):** Nichtlineare Versagensanalysen von Faserverbundstrukturen. *Dissertation, Bericht Nr. 39, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Holzapfel, G.A. (2000):** Nonlinear Solid Mechanics. *John Wiley & Sons, Chichester, UK.*
- Hughes, T.J.R. (1987):** The Finite Element Method; Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis. *Prentice-Hall, Englewood Cliffs, USA.*
- Karypis, G., Kumar, V. (1998):** METIS 4.0: Unstructured graph partitioning and sparse matrix ordering system. *Technical Report, Department of Computer Science, University of Minnesota.*
- Karypis, G., Kumar, V. (1998):** Multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs, *Journal of Parallel and Distributed Computing*, **48**, 96–129.
- Kikuchi, N., Oden, J.T. (1988):** Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods. *SIAM Press, Philadelphia, USA.*
- Küster, U. (2001):** Persönliche Gespräche, *Rechenzentrum der Universität Stuttgart.*
- Kuhl, D. (1996):** Stabile Zeitintegrationsalgorithmen in der nichtlinearen Elastodynamik dünnwandiger Tragwerke. *Dissertation, Bericht Nr. 22, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Kuhl, D., Ramm, E. (1999):** Generalized Energy–Momentum Method for non-linear adaptive shell dynamics, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **178**, 343–366.
- Kuhl, D., Ramm, E. (2000):** Time Integration in the Context of Energy Control and Locking Free Finite Elements, *Archives of Computational Methods in Engineering*, **7**, 299–332.
- Langer, U. (1992):** Substrukturtechnik und Schwarzsche Methoden, *Mitteilungen der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM)*, **15**, 86–103.
- Laursen, T.A. (1992):** Formulation and Treatment of Frictional Contact Problems using Finite Elements. *PhD-Thesis, Technical Report No. 92–6, Stanford University, USA.*
- Laursen, T.A. (2002):** Computational Contact and Impact Mechanics. *Springer Verlag, Berlin, Deutschland.*
- Li, X.S., Demmel, J.W. (1999):** A scalable sparse direct solver using static pivoting, in: *Proceedings of the Ninth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, San Antonio, Texas, USA.*
- Le Tallec, P. (1994):** Domain decomposition methods in computational mechanics, *Computational Mechanics Advances*, **1**, 121–220.
- Mandel, J., Brezina, M., Vanek, P. (1999):** Energy Optimization of Algebraic Multigrid Bases, *Computing*, **62**, 205–228.
- Mang, H., Hofstetter, G. (2000):** Festigkeitslehre. *Springer Verlag, Wien, Österreich.*
- Manteuffel, T. (1980):** An incomplete factorization technique for positive definite linear systems, *Mathematics of Computation*, **34**, 473–497.
- Marsden, J.E., Hughes, T.J.R. (1983):** Mathematical Foundations of Elasticity. *Prentice-Hall, Englewood Cliffs, USA.*
- McCormick, S.F. (Editor) (1986):** Multigrid Methods. *Frontiers in Applied Mathematics 5, SIAM, Philadelphia, USA.*
- McDevitt, T.W., Laursen, T.A. (2000):** A mortar–finite element formulation for frictional contact problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **48**, 1525–1547.
- Meijering, J., van der Vorst, H. (1977):** An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M–matrix, *Mathematics of Computation*, **31**, 148–162.
- Message Passing Interface Forum (1995):** MPI: A Message–Passing Interface Standard. *erhältlich unter <http://www.mpich-forum.org>.*
- Mok, D.P. (2001):** Partitionierte Lösungsansätze in der Strukturmechanik und in der Fluid–Struktur–Interaktion. *Dissertation, Bericht Nr. 36, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Naghdi, P.M. (1972):** The Theory of Shells, in: *Flügge (Hrsg.): Handbuch der Physik, Band VI/2, Springer Verlag, Berlin, Deutschland.*

- Newmark, N.M. (1959):** A Method of Computation for Structural Dynamics, *Journal of the Engineering Mechanics Division ASCE*, **85**, 67–94.
- Özdemir, I. (2003):** An Approach to Contact in Computational Structural Dynamics. *Master Thesis, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Ogden, R.W. (1984):** Non–Linear Elastic Deformations. *Ellis Horwood Ltd., Chichester, UK.*
- Parisch, H. (1989):** A consistent tangent stiffness matrix for three dimensional non–linear contact analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **28**, 1803–1812.
- Papadrakakis, M. (1997):** Domain Decomposition Techniques for Computational Structural Mechanics, in: *Papadrakakis, M. (Editor): Parallel Solution Methods in Computational Mechanics, John Wiley & Sons, Chichester, UK.*
- Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P. (1992):** Numerical recipes in C, Second Edition. *Cambridge University Press, Cambridge, UK.*
- Puso, M., Laursen T.A. (2003):** A Large Deformation 3D Mortar Contact Method, in: *Proceedings of the U. S. National Congress on Computational Mechanics USNCCM7, 28.–30. Juli 2003, Albuquerque, USA.*
- Quarteroni, A., Valli, A. (1999):** Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. *Oxford University Press, New York, USA.*
- Quarteroni, A., Sacco, R., Saleri, F. (2000):** Numerical Mathematics. *Springer Verlag, New York, USA.*
- Ramm, E., Gee, M., Wall, W.A. (2003):** A Multilevel Approach to the Solution of Large–Scale Nonlinear Shell Problems, in: *Franca, L.P. (Editor): Finite Element Methods: 1970's and beyond, CIMNE Press, Barcelona, Spanien.*
- Ramm, E., Wall, W.A. (2003):** Shell Structures – A Sensitive Interrelation between Physics and Numerics, *Zur Veröffentlichung eingereicht bei International Journal for Numerical Methods in Engineering.*
- Ruge, J. (1986):** AMG for problems of elasticity, *Applied Mathematics and Computation*, **19**, 293–309.
- Ruge, J., Stüben, K., (1986):**, Algebraic Multigrid, in: *McCormick, S.F. (Editor): Multigrid Methods, Frontiers in Applied Mathematics 5, SIAM, Philadelphia, USA.*
- Saad, Y. (1994):** SPARSKIT: a basic tool kit for sparse matrix computations, version 2. *erhältlich unter <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/software/SPARSKIT/sparskit.html> .*
- Saad, Y. (1996):** Iterative Methods for Sparse Linear Systems. *PWS publishing, New York, USA, nicht lieferbar, erhältlich unter <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html> .*
- Saad, Y., van der Vorst, H.A. (2000):** Iterative Solution of Linear Systems in the 20–th Century, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **123**, 1–33.
- Schwarz H.A. (1870):** Ueber einen Grenzübergang durch alternirendes Verfahren, *Vierteljahresschrift der Naturforschenden Gesellschaft Zürich*, **15**, 272–286.
- Simo, J.C., Rifai, M.S. (1990a):** A Class of Mixed Assumed Strain Methods and the Method of Incompatible Modes, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **29**, 1595–1638.
- Simo, J.C., Rifai, M.S., Fox, D.D. (1990b):** On a stress resultant geometrically exact shell model. Part IV: Variable thickness shells with through–the–thickness stretching, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **81**, 91–126.
- Simo, J.C., Tarnow, N. (1994):** A New Energy and Momentum Conserving Algorithm for the Nonlinear Dynamics of Shells, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **37**, 2527–2549.
- Smith, B., Bjørstad, P., Gropp, W. (1996):** Domain Decomposition. *Cambridge University Press, Cambridge, UK.*
- van der Sluis, van der Vorst, H.A. (1986):** The Rate of Convergence of Conjugate Gradients, *Numerische Mathematik*, **48**, 543–560.
- Stüben, K. (2001):** A review of algebraic multigrid, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **128**, 281–309.

- Tuminaro, R., Heroux, M., Hutchinson, S.A., Shadid, J.N. (1999):** Official Aztec User's Guide Version 2.1, *Technical Report SAND99-8801J, Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA.*
- Tong, C., Tuminaro, R. (2000):**, ML 2.0 smoothed aggregation users guide, *Technical Report SAND2001-8028, Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA.*
- Tuminaro, R., Tong, C. (2000):** Parallel Smoothed Aggregation Multigrid: Aggregation Strategies on Massively Parallel Machines, in: *Donnelley, J. (Editor): Proceedings of Supercomputing 2000, Santa Fe, New Mexico, USA.*
- Tuminaro, R., Tong, C., Shadid, J.N., Devine, K.D., Day, D.M. (2002):** On a Multilevel Preconditioning Module for Unstructured Mesh Krylov solvers: Two-level Schwarz, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, **18**, 363–389.
- Vandepitte, D., van den Steen, A., van Impe, R., Lagae, G., Rathe, J. (1988):** Elastic and Elastic-Plastic Buckling of Liquid-Filled Conical Shells, in: *Elishakoff, I. et al. (Editoren): Studies in Applied Mechanics 19: Buckling of Structures, Theory and Experiment, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Holland.*
- van der Vorst, H.A. (2003):** Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems. *Cambridge University Press, Cambridge, UK.*
- Vanek, P., Mandel, J., Brezina, M. (1996):** Algebraic Multigrid by Smoothed Aggregation for Second and Fourth Order Elliptic Problems, *Computing*, **56**, 179–196.
- Vanek, P., Brezina, M., Tezaur, R. (1999):** Two-Grid Method for Linear Elasticity on Unstructured Meshes, *SIAM Journal on Scientific Computing*, **21**, 900–923.
- Vanek, P., Brezina, M., Mandel, J. (2001):** Convergence of algebraic multigrid based on smoothed aggregation, *Numerische Mathematik*, **88**, 559–579.
- Wagner, C. (1998):** Introduction to Algebraic Multigrid. *Interdisziplinäres Zentrum für wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg, Deutschland.*
- Waisman, H., Fish, J., Tuminaro, R.S., Shadid, J. (2003):** The Generalized Global Basis (GGB) Method, zur Veröffentlichung eingereicht bei *International Journal for Numerical Methods in Engineering.*
- Wall, W.A. (1999):** Fluid-Struktur-Interaktion mit stabilisierten Finiten Elementen. *Dissertation, Bericht Nr. 31, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.*
- Wall, W.A., Gee, M., Ramm, E. (2000):** The challenge of a three-dimensional shell formulation – the conditioning problem –, in: *Conference Proceedings of IASS-IACM 2000, Chania-Kreta, Griechenland, 5.–7. Juni 2000.*
- Wesseling, P. (1992):** An Introduction to Multigrid Methods. *John Wiley & Sons, Chichester, UK.*
- Wohlmuth, B.I. (2001):** Discretization Methods and Iterative Solvers Based on Domain Decomposition. Lecture Notes in Computational Science in Engineering, Volume 17, *Springer Verlag, Berlin, Deutschland.*
- Wriggers, P., Simo, J.C. (1985):** A note on tangent stiffness for fully nonlinear contact problems, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, **1**, 199–203.
- Wriggers, P., Vu Van, T., Stein, E. (1990):** Finite Element formulation of large deformation impact-contact problems with friction, *Computers and Structures*, **37**, 319–331.
- Wriggers, P. (2002):** Computational Contact Mechanics. *John Wiley & Sons, Chichester, UK.*
- Yserentant, H. (1986a):** On the multi-level splitting of finite element spaces, *Numerische Mathematik*, **49**, 379–412.
- Yserentant, H. (1986b):** Hierarchical bases give conjugate gradient type methods a multigrid speed of convergence, *Applied Mathematics and Computation*, **19**, 347–358.
- Zhang, X. (1991):** Studies in Domain Decomposition: Multi-level Methods and the Biharmonic Dirichlet Problem. *PhD Thesis, Courant Institute, New York University, New York, USA.*
- Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L. (1991):** The Finite Element Method, Volume 2. 4. Ausgabe, *McGraw-Hill, London, UK.*

Anhang

A1 Direkte Lösungsverfahren (LU-Faktorisierung)

A1.1 Vorwärtseinsetzen

$L \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mit $L_{ii} \neq 0 \forall i$ ist eine untere Dreiecksmatrix. Man erhält die Lösung \hat{d} des Gleichungssystems $L\hat{d} = f$ durch:

$$\begin{aligned} \hat{d}_1 &= \frac{f_1}{L_{11}} , \\ \hat{d}_i &= \frac{1}{L_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij} \hat{d}_j \right] \quad i = 2, 3, \dots, N . \end{aligned} \tag{A.1}$$

A1.2 Rückwärtseinsetzen

$U \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mit $U_{ii} \neq 0 \forall i$ ist eine obere Dreiecksmatrix. Man erhält die Lösung d des Gleichungssystems $Ud = \hat{d}$ durch:

$$\begin{aligned} d_N &= \frac{\hat{d}_N}{U_{NN}} , \\ d_i &= \frac{1}{U_{ii}} \left[\hat{d}_i - \sum_{j=i+1}^N U_{ij} d_j \right] \quad i = N-1, N-2, \dots, 1 . \end{aligned} \tag{A.2}$$

A1.3 LU-Faktorisierung nach Crout

Die Faktorisierung einer quadratischen Matrix A in eine untere Dreiecksmatrix L und eine obere Dreiecksmatrix U , so dass gilt

$$A = LU \tag{A.3}$$

erfolgt in zwei Schritten. Zunächst werden die Hauptdiagonalwerte

$$L_{ii} \equiv 1 \quad i = 1, \dots, N \tag{A.4}$$

gesetzt. Die eigentliche Faktorisierung erfolgt dann spaltenweise:

$$\begin{array}{l} \text{Für Spalte } j = 1, \dots, N \\ \left[\begin{array}{l} U_{ij} = A_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} U_{kj} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, j \\ L_{ij} = \frac{1}{U_{jj}} \left[A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} U_{ik} L_{kj} \right] \quad , \quad i = j+1, j+2, \dots, N \end{array} \right. \end{array} \quad (\text{A.5})$$

wobei für $i, j = 1$ der Summenterm in den Ausdrücken Null ergibt. Es genügt den Algorithmus für zwei Spalten zu verfolgen, um festzustellen, dass alle benötigten Terme auf der rechten Seite zum Zeitpunkt ihrer Verwendung bereits existieren. Die LU-Faktorisierung findet auf dem Speicherplatz von A statt. Werte L_{ij} überschreiben A_{ij} für $i > j$, Werte U_{ij} überschreiben A_{ij} für $i \leq j$. Werte L_{ii} werden nicht gespeichert.

A2 Einige iterative Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme

A2.1 Jacobi-Iterationsverfahren

Wählt man $M^{-1} = D^{-1} = (\text{diag}(A))^{-1}$ so lautet die Jacobi-Iteration mit Iterationszähler k

$$d^{k+1} = (I - D^{-1}A)d^k + D^{-1}f \quad , \quad (\text{A.6})$$

beziehungsweise:

$$d_i^{k+1} = \frac{1}{A_{ii}} \left[f_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N A_{ij} d_j^k \right] \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad . \quad (\text{A.7})$$

Die Konvergenz ist nur garantiert, wenn A und $(2D - A)$ positiv definit sind, das heißt A strikt diagonal dominant ist.

A2.2 Gauss-Seidel-Iterationsverfahren

Wählt man $M^{-1} = (D + L)^{-1}$ mit $D = \text{diag}(A)$ und L als strikt unteren Dreiecksanteil von A , so lautet die Iterationsvorschrift des Gauss-Seidel-Verfahrens

$$d^{k+1} = (I - (D + L)^{-1}A)d^k + (D + L)^{-1}f \quad , \quad (\text{A.8})$$

beziehungsweise:

$$d_i^{k+1} = \frac{1}{A_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} d_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^N A_{ij} d_j^k \right], \quad i = 1, \dots, N. \quad (\text{A.9})$$

Es handelt sich um ein sogenanntes Einzelschrittverfahren (Hackbusch (1993)): Die Berechnung von d_i^{k+1} hängt direkt von den bereits berechneten Werten d_j^{k+1} , $j = 1, \dots, i - 1$ ab.

Werte d_i^{k+1} , $i = 1, \dots, N$ können daher nicht ohne weiteres simultan berechnet werden. Das Verfahren ist daher für eine einfache Parallelisierung nur bedingt geeignet. Zusätzlich ist $\mathbf{M}^{-1} = (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}$ nicht symmetrisch, das Verfahren stellt somit keine symmetrische Vorkonditionierung dar.

A2.3 Symmetrisches Gauss–Seidel–Iterationsverfahren

Das Gauss–Seidel–Iterationsverfahren kann symmetrisiert werden, indem man auf einen Durchgang der Gauss–Seidel–Iteration einen weiteren folgen lässt, bei der jedoch die Zeilen in umgekehrter Reihenfolge behandelt werden:

$$\begin{aligned} d_i^{k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{A_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} d_j^{k+\frac{1}{2}} - \sum_{j=i+1}^N A_{ij} d_j^k \right], \quad i = 1, \dots, N, \\ d_i^{k+1} &= \frac{1}{A_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} d_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^N A_{ij} d_j^{k+\frac{1}{2}} \right], \quad i = N, \dots, 1. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

A2.4 Vorkonditioniertes konjugiertes Gradientenverfahren (CG–Verfahren)

Die Iterationsvorschrift des parallelen CG–Verfahrens ist in (A.11) zusammengefasst, die in dieser Arbeit mehrheitlich verwendete Implementierung nach Barrett et al. ist in Gl. (A.12) gegeben. \mathbf{M} ist hierin eine symmetrische Vorkonditionierung.

Gegeben sei \mathbf{d}^0 , $\mathbf{r}^0 = \mathbf{f} - \mathbf{A}\mathbf{d}^0$, $\mathbf{z}^0 = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}^0$, $\mathbf{p}^0 = \mathbf{z}^0$.

Der Iterationsschritt k lautet dann :

$$\left[\begin{array}{l} \omega_k = \frac{(\mathbf{p}^k)^T \mathbf{r}^k}{(\mathbf{p}^k)^T \mathbf{A} \mathbf{p}^k} \\ \mathbf{d}^{k+1} = \mathbf{d}^k + \omega_k \mathbf{p}^k \\ \mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k - \omega_k \mathbf{A} \mathbf{p}^k \\ \mathbf{z}^{k+1} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r}^{k+1} \\ \beta_k = \frac{(\mathbf{z}^{k+1})^T \mathbf{A} \mathbf{p}^k}{(\mathbf{p}^k)^T \mathbf{A} \mathbf{p}^k} \\ \mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{z}^{k+1} - \beta_k \mathbf{p}^k \end{array} \right. \quad (\text{A.11})$$

Gegeben sei eine Schätzung \mathbf{d} , $\mathbf{r} = \mathbf{f} - \mathbf{A}\mathbf{d}$, sowie Vektoren $\mathbf{p}, \mathbf{z}, \mathbf{q}$ und Skalare $\omega, \beta, \gamma_1, \gamma_2$

Für $k = 0, 1, 2, \dots$

$$\left[\begin{array}{l} \mathbf{z} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r} \\ \gamma_1 = \mathbf{r}^T \mathbf{z} \\ \text{Wenn } k = 0 \\ \quad \left| \begin{array}{l} \mathbf{p} = \mathbf{z} \end{array} \right. \\ \text{Sonst} \\ \quad \left[\begin{array}{l} \beta = \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \\ \mathbf{p} \leftarrow \mathbf{z} + \beta \mathbf{p} \end{array} \right. \\ \mathbf{q} = \mathbf{A} \mathbf{p} \\ \omega = \frac{\gamma_1}{\mathbf{p}^T \mathbf{q}} \\ \mathbf{d} \leftarrow \mathbf{d} + \omega \mathbf{p} \\ \mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r} - \omega \mathbf{q} \\ \text{Prüfe } \sqrt{\mathbf{z}^T \mathbf{r}} < \epsilon \\ \gamma_2 = \gamma_1 \end{array} \right. \quad (\text{A.12})$$

A3 Basisvorkonditionierungsverfahren

A3.1 Skalierung des linearen Gleichungssystems

Existieren unter den Koeffizienten A_{ij} der Matrix A große betragsmäßige Unterschiede, so ist es sinnvoll, das Gleichungssystem vor der Lösung zu skalieren. Bei Schalenproblemen resultieren solche Skalenerunterschiede in der Systemmatrix aus der unterschiedlichen physikalischen Bedeutung der Freiheitsgrade eines Knotens.

Eine Skalierung kann durch Multiplikation von links mit einer nicht-singulären Diagonalmatrix D vorgenommen werden, so dass das skalierte Gleichungssystem die Form

$$DA\mathbf{d} = D\mathbf{f} \quad (\text{A.13})$$

annimmt. Es sei A_{i*} die Zeile i und A_{*j} die Spalte j von A . Werte D_{ii} , $i = 1, \dots, N$ werden so gewählt, dass die Zeilennormen $\|A_{i*}\|_\infty$, $i = 1, \dots, N$ dicht beieinander liegen. Die Symmetrie des Gleichungssystems geht bei dieser Zeilenskalierung (row scaling) jedoch verloren. Muss die Symmetrie des Gleichungssystems erhalten bleiben (zum Beispiel wenn zur Gleichungslösung das CG-Verfahren verwendet werden soll), so kann eine Zeilen- und Spaltenskalierung (symmetric scaling) mittels zweier nicht-singulärer Diagonalmatrizen $D_1 = D_2 = D$ vorgenommen werden:

$$D_1 A D_2 \hat{\mathbf{d}} = D_1 \mathbf{f} \quad ; \quad \mathbf{d} = D_2 \hat{\mathbf{d}} \quad (\text{A.14})$$

Nach Ferencz und Hughes (1998) ist für die Koeffizienten von D bei strukturmechanischen Problemen eine gängige und gute Wahl:

$$D_{ii} = A_{ii}^{-\frac{1}{2}}, \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{A.15})$$

Die (numerisch preiswerte) Skalierung sollte für Gleichungssysteme mit Unbekannten unterschiedlicher physikalischer Einheit auf jeden Fall durchgeführt werden.

Für eine detailliertere Abschätzung der Rundungsfehlerreduktion siehe Golub et al. (1986).

A3.2 Vorkonditionierung auf der Basis additiver Matrixzerlegung

Aus einer additiven Zerlegung $A = L + D + U$ der Koeffizientenmatrix in einen streng unteren und streng oberen Dreiecksanteil L und U sowie einen Diagonalanteil $D = \text{diag}(A)$ wurden in Kap. 4.3.3 Vorkonditionierungsmatrizen für vorkonditionierte stationäre Richardson Iterationen (Gl. (4.18)) gebildet.

Hierbei ist

$$\mathbf{M}_J^{-1} = \mathbf{D}^{-1} = (\text{diag}(\mathbf{A}))^{-1}, \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbf{M}_{SGS}^{-1} = (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1} \mathbf{D} (\mathbf{D} + \mathbf{U})^{-1}, \quad (\text{A.17})$$

die Vorkonditionierung der Jacobi-Iteration beziehungsweise der symmetrischen Gauss-Seidel-Iteration, die als eigenständige Iterationsverfahren in Anhang A2 aufgeführt sind. Führt man eine solche Iteration nicht bis zur Erfüllung eines Konvergenzkriteriums durch, sondern limitiert die Anzahl p der Iterationen, so kann man diese Iterationsverfahren wiederum als Vorkonditionierung für das CG-Verfahren verwenden. Man spricht dann von p -Schritt Jacobi-Vorkonditionierung beziehungsweise p -Schritt symmetrische Gauss-Seidel-Vorkonditionierung, die als $\mathbf{M}_J^{-1}(p)$ respektive $\mathbf{M}_{SGS}^{-1}(p)$ bezeichnet werden sollen. Die Vorkonditionierung Gl. (4.29) ist dann:

$$\mathbf{z} = \mathbf{M}^{-1}(p) \mathbf{r}. \quad (\text{A.18})$$

Exemplarisch lautet die p -Schritt Jacobi-Vorkonditionierung:

$$\mathbf{M}_J^{-1}(p) : \mathbf{z}^k = (\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1} \mathbf{A}) \mathbf{z}^{k-1} + \mathbf{D}^{-1} \mathbf{r}, \quad k = 1, \dots, p, \quad \mathbf{z}^0 = \mathbf{0}. \quad (\text{A.19})$$

Für $p = 1$ geht Gl. (A.19) in die Form Gl. (A.16) über.

Vorkonditionierungen auf der Basis additiver Zerlegung der Koeffizientenmatrix sind verhältnismäßig einfach umzusetzen, preiswert in der Anwendung und benötigen sehr wenig Speicherplatz. Die erzielte Konvergenzbeschleunigung ist jedoch eher gering, wie in Kap. 4.4.1 gezeigt wird.

A3.3 Vorkonditionierung auf der Basis multiplikativer Matrixzerlegung

In Kap. 4.3.1 wird als direkte Gleichungslösung die LU-Faktorisierung erwähnt, die eine multiplikative Zerlegung der Koeffizientenmatrix

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}, \quad \mathbf{A} \text{ nichtsingulär} \quad (\text{A.20})$$

vornimmt, worin \mathbf{L} und \mathbf{U} untere und obere Dreiecksmatrizen sind. Eine Vorkonditionierung auf dieser Basis ermittelt Faktoren $\tilde{\mathbf{L}}$ und $\tilde{\mathbf{U}}$, welche Näherungen der vollständigen Faktoren \mathbf{L} und \mathbf{U} darstellen. Diese *unvollständige* LU-Faktorisierung wird als ILU-Zerlegung (von Incomplete LU) bezeichnet. Die ILU-Vorkonditionierungsmatrix lautet:

$$\mathbf{M}_{ILU}^{-1} = (\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{U}})^{-1} \approx (\mathbf{L}\mathbf{U})^{-1} = \mathbf{A}^{-1}. \quad (\text{A.21})$$

Die Faktoren $\tilde{\mathbf{L}}$ und $\tilde{\mathbf{U}}$ werden so bestimmt, dass sie Beschränkungen hinsichtlich einer Belegungsstruktur $S(\tilde{\mathbf{L}})$, $S(\tilde{\mathbf{U}})$ mit von Null verschiedenen Einträgen erfüllen.

Die Belegungsstruktur S einer Matrix A ist:

$$S(A) = \left\{ (i, j) \mid A_{ij} \neq 0, i, j = 1, \dots, N \right\} . \quad (\text{A.22})$$

Die Vorgabe von $S(\tilde{L})$ und $S(\tilde{U})$ begrenzt den erforderlichen Speicherplatz sowie die Anzahl der Operationen bei der Anwendung der Vorkonditionierung Gl. (A.21) auf einen Vektor nach Gl. (4.12) und (4.13).

Die Existenz einer unvollständigen Faktorisierung bei vorgegebener Belegungsstruktur ist im allgemeinen nicht garantiert⁷. Sie muss daher durch geeignete Maßnahmen stabilisiert werden. Dies geschieht zum einen durch Pivotisierung aber auch durch Regularisierung (Barrett (2002), Manteuffel (1980)).

Die Bandbreite b_A von A bleibt bei der *vollständigen* Faktorisierung in den Matrixfaktoren L und U erhalten. Innerhalb dieser Bandbreite enthalten diese jedoch im Vergleich zu A zusätzliche von Null verschiedene Einträge, die als sogenannter *fill-in* bezeichnet werden.

Für die Belegungsstruktur der Matrixfaktoren gilt demnach:

$$S(L) \cup S(U) \supseteq S(A) . \quad (\text{A.23})$$

Für die Restriktion der Belegungsstruktur $S(\tilde{L})$, $S(\tilde{U})$ der *unvollständigen* Faktoren und die Begrenzung des *fill-in* gibt es (neben unzähligen Variationen) zwei Hauptstrategien, die als ILUT- und als ILU(p)-Faktorisierung bezeichnet werden (Axelsson (1994), Saad (1996)):

ILUT-Faktorisierung:

Bei der ILUT-Faktorisierung (von Incomplete LU factorization with Threshold) werden Koeffizienten der Matrixfaktoren \tilde{L} und \tilde{U} aufgrund ihres Betrages beibehalten oder zu Null gesetzt. Es wird eine Schranke $\epsilon > 0$ definiert, so dass Werte \tilde{L}_{ij} , \tilde{U}_{ij} mit

$$|\tilde{L}_{ij}| < \epsilon \quad ; \quad |\tilde{U}_{ij}| < \epsilon \quad , \quad i, j = 1, \dots, N \quad , \quad i \neq j \quad , \quad (\text{A.24})$$

während der Faktorisierung vernachlässigt werden. A sollte vor einer solchen schrankenkontrollierten unvollständigen Faktorisierung skaliert werden (Anhang A3.1), da sonst die Wahl einer geeigneten Schranke nicht möglich ist. Für die in dieser Arbeit betrachteten Gleichungssysteme mit Unbekannten unterschiedlicher physikalischer Bedeutung ist die ILUT-Faktorisierung eher nicht geeignet, da sie (trotz Skalierung des Gleichungssystems) systematisch die Einträge vernachlässigt, die physikalisch bedingt betragsmäßig klein sind, während Einträge, die physika-

7. Die Existenz einer unvollständigen Faktorisierung auf einer für die Matrixfaktoren vorgegebenen Belegungsstruktur S (die die Diagonale enthält) wurde von Meijering und van der Vorst (1977) für M -Matrizen bewiesen. Eine Matrix A ist eine M -Matrix, wenn A nicht-singulär und $|A_{ij}| < 0 \forall i \neq j$. Diese Eigenschaft ist bei den in dieser Arbeit vorkommenden Systemmatrizen jedoch nicht gegeben.

lich bedingt groß sind, bei der Faktorisierung berücksichtigt werden. Die resultierende Vorkonditionierung ist dann zwischen den einzelnen Freiheitsgraden von unausgewogener Qualität.

ILU(p)–Faktorisierung:

Bei der ILU(p)–Faktorisierung werden strukturelle Vorgaben für $S(\tilde{\mathbf{L}})$ und $S(\tilde{\mathbf{U}})$ gemacht, die unabhängig vom Betrag der Koeffizienten sind. Sie ist für Gleichungssysteme mit Unbekannten unterschiedlicher physikalischer Natur daher besser geeignet als die ILUT–Faktorisierung.

Bei der ILU(0)–Faktorisierung ist

$$S(\tilde{\mathbf{L}}_{ILU(0)}) \cup S(\tilde{\mathbf{U}}_{ILU(0)}) = S(\mathbf{A}) , \quad (\text{A.25})$$

jeglicher *fill-in* außerhalb der Belegungsstruktur von \mathbf{A} wird vernachlässigt. Die Belegungsstruktur des Produktes der beiden Matrixfaktoren $\tilde{\mathbf{L}}_{ILU(0)}$ und $\tilde{\mathbf{U}}_{ILU(0)}$ ist größer als die Belegungsstruktur von \mathbf{A} und dient als Vorgabe für die ILU(1)–Faktorisierung:

$$S(\tilde{\mathbf{L}}_{ILU(1)}) \cup S(\tilde{\mathbf{U}}_{ILU(1)}) = S(\tilde{\mathbf{L}}_{ILU(0)} \tilde{\mathbf{U}}_{ILU(0)}) > S(\mathbf{A}) . \quad (\text{A.26})$$

Allgemein ergibt sich für die ILU(p)–Zerlegung:

$$S(\tilde{\mathbf{L}}_{ILU(p+1)}) \cup S(\tilde{\mathbf{U}}_{ILU(p+1)}) = S(\tilde{\mathbf{L}}_{ILU(p)} \tilde{\mathbf{U}}_{ILU(p)}) . \quad (\text{A.27})$$

Dieser Zusammenhang ist für $p = 0, 1, 2$ in Abb. A.1 schematisch veranschaulicht.

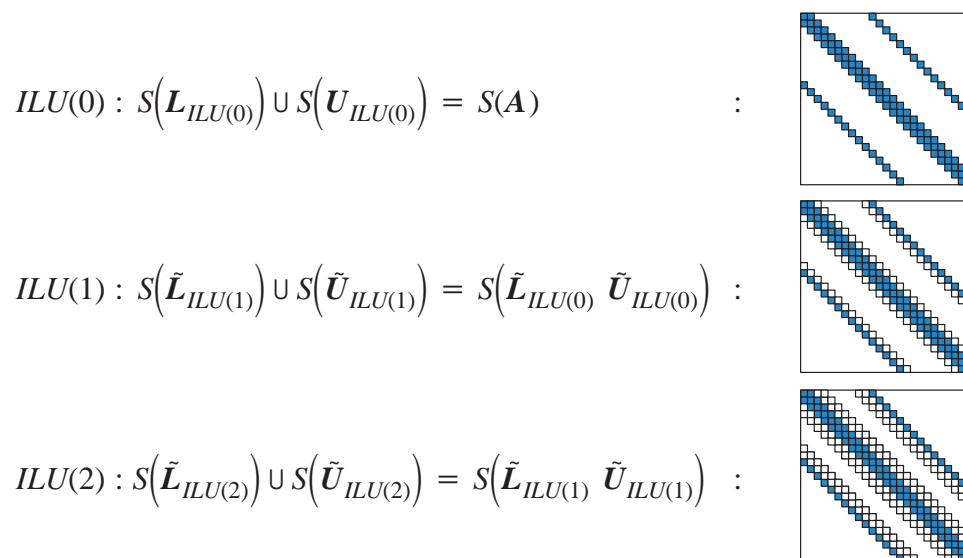


Abb. A.1: Belegungsstrukturen bei ILU(p), $p < 3$ Faktorisierung (Darstellung schematisch)
Für große p geht die Belegungsstruktur der Matrixfaktoren in diejenige einer vollständigen LU–Faktorisierung über. Für eine Implementierung der ILU(p)–Faktorisierung ist es nicht nötig, die Belegungsstruktur aus der Rekursion Gl. (A.27) zu ermitteln. Für gegebene Belegung $S(\mathbf{A})$ und festes p lässt sich $S(\tilde{\mathbf{L}}_{ILU(p)})$ und $S(\tilde{\mathbf{U}}_{ILU(p)})$ über eine sogenannte Levelfunktion direkt bestimmen (Saad (1996), Quarteroni et al. (2000)). Der Algorithmus der ILU(p)–Faktorisierung mit

Levellfunktion nach Quarteroni et al. (2000) wird im folgenden näher erläutert:

Die Faktoren \tilde{L} und \tilde{U} überschreiben die Matrix $A^{N \times N}$. Ferner sei für jedes Indexpaar $i, j = 1, \dots, N$ die Levelfunktion $lev(i, j)$ definiert.

Der Ausgangswert der Levelfunktionen sei

$$lev(i, j) = \begin{cases} 0 & \text{für alle } A_{ij} \neq 0 \text{ oder } i = j, \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.28})$$

Die zeilenweise ILU(p)-Faktorisierung ist dann:

$$\begin{array}{l} L_{ii} \equiv 1 \quad i = 1, \dots, N \\ \text{Für } i = 2, \dots, N \\ \quad \left[\begin{array}{l} \text{Für } k = 1, \dots, i - 1 \\ \quad \left[\begin{array}{l} \text{Wenn } lev(i, k) \leq p \\ \quad \left[\begin{array}{l} A_{ik} \leftarrow \frac{A_{ik}}{A_{kk}} \\ \text{Für } j = k + 1, \dots, N \\ \quad \left[\begin{array}{l} A_{ij} \leftarrow A_{ij} - A_{ik} A_{kj} \\ \text{Wenn } A_{ij} \neq 0 \\ \quad \left[lev(i, j) = \min(lev(i, j), lev(i, k) + lev(k, j) + 1) \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \quad (\text{A.29}) \\ \quad \left[\begin{array}{l} \text{Für } j = 1, \dots, N \\ \quad \left[\begin{array}{l} \text{Wenn } lev(i, j) > p \\ \quad \left[A_{ij} = 0 \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array}$$

Während der überschreibenden Faktorisierung Gl. (A.29) wird die Levelfunktion eines Indexpaares über

$$lev(i, j) = \min(lev(i, j), lev(i, k) + lev(k, j) + 1) \quad (\text{A.30})$$

aktualisiert. Sind A_{ik} und A_{kj} von Null verschiedene Werte der ursprünglichen Matrix A , so haben sie den Levelfunktionswert $lev(i, k) = lev(k, j) = 0$. Nach Gl. (A.30) wird einem von Null verschiedenem *fill-in*-Wert A_{ij} dann der Levelfunktionswert $lev(i, j) = 1$ zugeordnet. Werte A_{ij} mit $lev(i, j) > p$ werden nach vollständiger Faktorisierung der Zeile i zu Null angenommen. Der Wert der Levelfunktion $lev(i, j)$ eines Eintrages A_{ij} kann im Laufe der Faktorisierung nur abnehmen. Einträge A_{ij} mit einem Levelfunktionswert $lev(i, j) = 0$ (Nicht-Null Einträge der ursprünglichen Matrix A) behalten diesen Wert während des gesamten Faktorisierungsprozesses.

Anmerkung: Sowohl bei der ILUT- als auch der ILU(p)-Faktorisierung ist eine Aussage über die Menge des benötigten Speicherplatzes im voraus nicht möglich, so dass eine dynamische Speicherverwaltung der dünnbesetzten Matrizen nötig ist. Bei der ILU(p)-Faktorisierung

rung kann jedoch eine symbolische Faktorisierung nur unter Berücksichtigung der Levelfunktion durchgeführt werden. Danach erfolgt die eigentliche Faktorisierung mit der dann bekannten Belegungsstruktur und bekanntem Speicherbedarf der unvollständigen Matrixfaktoren.

Eine detailliertere Behandlung dieser und weiterer Arten unvollständiger Faktorisierungen für symmetrische und unsymmetrische Koeffizientenmatrizen findet man bei Barrett et al. (2002), Chow (1997), Quarteroni et al. (2000) und Saad ((1996).

A3.4 Sonstige Basisvorkonditionierungen

Neben den beschriebenen Vorkonditionierungen auf der Basis additiver und multiplikativer Zerlegung der Koeffizientenmatrix gibt es eine Reihe weiterer Techniken, die aus Platzgründen jedoch nicht behandelt werden. Genannt werden sollen jedoch noch die Gruppe der sogenannten Approximate–Inverse–Vorkonditionierungen (Benzi (1993) und Benzi und Tuma (1999)), die 'Element–by–Element'–Vorkonditionierung von Ferencz und Hughes (1998) sowie die Gruppe der sogenannten Polynom–Vorkonditionierungen, für die auf Papadrakakis (1997) und Saad (1996) verwiesen wird.

mit den Basisvektoren der Masterkontaktoberfläche im Projektionspunkt $\hat{\boldsymbol{\theta}}$

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \bar{\boldsymbol{a}}_{\alpha}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + \theta^{3[2]} \bar{\boldsymbol{a}}_{3,\alpha}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) , \quad (\text{A.34})$$

und

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} = \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} + g \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta} \right) = \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} + g \boldsymbol{\nu} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha,\beta} \right) , \quad (\text{A.35})$$

$$\boldsymbol{D}_1^c = \frac{1}{\det(\tilde{\boldsymbol{\tau}})} \left[\tilde{\boldsymbol{\tau}}_{22}(\boldsymbol{T}_1^c + g\boldsymbol{N}_1^c) - \tilde{\boldsymbol{\tau}}_{12}(\boldsymbol{T}_2^c + g\boldsymbol{N}_2^c) \right] , \quad (\text{A.36})$$

$$\boldsymbol{D}_2^c = \frac{1}{\det(\tilde{\boldsymbol{\tau}})} \left[-\tilde{\boldsymbol{\tau}}_{21}(\boldsymbol{T}_1^c + g\boldsymbol{N}_1^c) + \tilde{\boldsymbol{\tau}}_{11}(\boldsymbol{T}_2^c + g\boldsymbol{N}_2^c) \right] .$$

Für die Steifigkeitsmatrizen des Normal- und Tangentialkontakts müssen einige weitere Hilfsvektoren definiert werden:

$$\tilde{\boldsymbol{N}}_1^c = \boldsymbol{N}_1^c - \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{1,2}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \cdot \boldsymbol{\nu} \right) \boldsymbol{D}_2^c , \quad (\text{A.37})$$

$$\tilde{\boldsymbol{N}}_2^c = \boldsymbol{N}_2^c - \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{2,1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \cdot \boldsymbol{\nu} \right) \boldsymbol{D}_1^c ,$$

und

$$\boldsymbol{\pi}_T = \frac{\boldsymbol{t}_{Tn+1}^{pred}}{\| \boldsymbol{t}_{Tn+1}^{pred} \|} \quad (\text{A.38})$$

in ko- und kontravarianter Darstellung, sowie

$$\boldsymbol{T}_{\alpha\beta}^c = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ -N_{1,\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha} \\ -N_{1,\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha} \\ \vdots \\ -N_{4,\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha} \\ -N_{4,\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{N}_{\alpha\beta}^c = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ -N_{1,\alpha\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \boldsymbol{\nu} \\ -N_{1,\alpha\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \boldsymbol{\nu} \\ \vdots \\ -N_{4,\alpha\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \boldsymbol{\nu} \\ -N_{4,\alpha\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \boldsymbol{\nu} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\Pi}_{\alpha}^c = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ -N_{1,\alpha}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \boldsymbol{\pi}_T \\ -N_{1,\alpha}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \boldsymbol{\pi}_T \\ \vdots \\ -N_{4,\alpha}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \boldsymbol{\pi}_T \\ -N_{4,\alpha}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \boldsymbol{\pi}_T \end{bmatrix} , \quad (\text{A.39})$$

$$\tilde{\boldsymbol{T}}_{\alpha 1}^c = \boldsymbol{T}_{\alpha 1}^c - \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{1,2}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha} \right) \boldsymbol{D}_2^c ,$$

$$\tilde{\boldsymbol{T}}_{\alpha 2}^c = \boldsymbol{T}_{\alpha 2}^c - \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{2,1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha} \right) \boldsymbol{D}_1^c ,$$

$$\tilde{\boldsymbol{\Pi}}_1^c = \boldsymbol{\Pi}_1^c - \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{1,2}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \cdot \boldsymbol{\pi}_T \right) \boldsymbol{D}_2^c ,$$

$$\tilde{\boldsymbol{\Pi}}_2^c = \boldsymbol{\Pi}_2^c - \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}_{2,1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \cdot \boldsymbol{\pi}_T \right) \boldsymbol{D}_1^c .$$

(A.40)

Die Steifigkeitsmatrix des Normalkontakts \mathbf{K}_N^c in Gl. (7.62) ergibt sich dann zu:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_N^c &= t_N \mathbf{N}^c \mathbf{N}^{cT} \\ &+ t_n g \left(\bar{\tau}^{11} \tilde{\mathbf{N}}_1^c \mathbf{N}_1^{cT} + \bar{\tau}^{12} \tilde{\mathbf{N}}_1^c \mathbf{N}_2^{cT} + \bar{\tau}^{21} \tilde{\mathbf{N}}_2^c \mathbf{N}_1^{cT} + \bar{\tau}^{22} \tilde{\mathbf{N}}_2^c \mathbf{N}_2^{cT} \right) \\ &+ t_n \left(-\mathbf{D}_1^c \mathbf{N}_1^{cT} - \mathbf{D}_2^c \mathbf{N}_2^{cT} - \mathbf{N}_1^c \mathbf{D}_1^{cT} - \mathbf{N}_2^c \mathbf{D}_2^{cT} \right) \\ &+ t_n \mathbf{v} \cdot \left(\bar{\tau}_{1,2} \mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_2^{cT} + \bar{\tau}_{2,1} \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_1^{cT} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

Die Reibsteifigkeitsmatrix \mathbf{K}_T^c setzt sich zusammen aus:

$$\mathbf{K}_T^c = \left(t_{T1} \tilde{\tau}^{11} + t_{T2} \tilde{\tau}^{12} \right) \mathbf{K}_T^{c1} + \left(t_{T1} \tilde{\tau}^{21} + t_{T2} \tilde{\tau}^{22} \right) \mathbf{K}_T^{c2} + \mathbf{K}_T^{\text{Haft/Gleit}}. \quad (\text{A.42})$$

Die einzelnen Anteile sind:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_T^{c1} &= \mathbf{T}_{11}^c \mathbf{D}_1^{cT} + \mathbf{T}_{12}^c \mathbf{D}_2^{cT} + \mathbf{D}_1^c \mathbf{T}_{11}^{cT} + \mathbf{D}_2^c \mathbf{T}_{12}^{cT} \\ &- \left(\bar{\tau}_{1,2} \cdot \bar{\tau}_1 \right) \left(\mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_2^{cT} + \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_1^{cT} \right) \\ &+ \tilde{\mathbf{T}}_{11}^c \mathbf{D}_1^{cT} + \tilde{\mathbf{T}}_{21}^c \mathbf{D}_2^{cT} + \mathbf{D}_1^c \tilde{\mathbf{T}}_{11}^{cT} + \mathbf{D}_2^c \tilde{\mathbf{T}}_{21}^{cT} \\ &+ g \left(\mathbf{N}_{12}^c \mathbf{D}_2^{cT} + \mathbf{D}_2^c \mathbf{N}_{12}^{cT} \right) - \mathbf{N}^c \tilde{\mathbf{N}}_1^{cT} - \tilde{\mathbf{N}}_1^c \mathbf{N}^{cT} \\ &- \mathbf{T}_1^c \left(\bar{\tau}^{11} \tilde{\mathbf{T}}_{11}^c + \bar{\tau}^{12} \tilde{\mathbf{T}}_{21}^c \right)^T - \mathbf{T}_2^c \left(\bar{\tau}^{21} \tilde{\mathbf{T}}_{11}^c + \bar{\tau}^{22} \tilde{\mathbf{T}}_{21}^c \right)^T \\ &- \left(\bar{\tau}^{11} \tilde{\mathbf{T}}_{11}^c + \bar{\tau}^{12} \tilde{\mathbf{T}}_{21}^c \right) \mathbf{T}_1^{cT} - \left(\bar{\tau}^{21} \tilde{\mathbf{T}}_{11}^c + \bar{\tau}^{22} \tilde{\mathbf{T}}_{21}^c \right) \mathbf{T}_2^{cT}, \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_T^{c2} &= \mathbf{T}_{21}^c \mathbf{D}_1^{cT} + \mathbf{T}_{22}^c \mathbf{D}_2^{cT} + \mathbf{D}_1^c \mathbf{T}_{21}^{cT} + \mathbf{D}_2^c \mathbf{T}_{22}^{cT} \\ &- \left(\bar{\tau}_{1,2} \cdot \bar{\tau}_2 \right) \left(\mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_2^{cT} + \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_1^{cT} \right) \\ &+ \tilde{\mathbf{T}}_{12}^c \mathbf{D}_1^{cT} + \tilde{\mathbf{T}}_{22}^c \mathbf{D}_2^{cT} + \mathbf{D}_1^c \tilde{\mathbf{T}}_{12}^{cT} + \mathbf{D}_2^c \tilde{\mathbf{T}}_{22}^{cT} \\ &+ g \left(\mathbf{N}_{21}^c \mathbf{D}_1^{cT} + \mathbf{D}_1^c \mathbf{N}_{21}^{cT} \right) - \mathbf{N}^c \tilde{\mathbf{N}}_2^{cT} - \tilde{\mathbf{N}}_2^c \mathbf{N}^{cT} \\ &- \mathbf{T}_1^c \left(\bar{\tau}^{11} \tilde{\mathbf{T}}_{12}^c + \bar{\tau}^{12} \tilde{\mathbf{T}}_{22}^c \right)^T - \mathbf{T}_2^c \left(\bar{\tau}^{21} \tilde{\mathbf{T}}_{12}^c + \bar{\tau}^{22} \tilde{\mathbf{T}}_{22}^c \right)^T \\ &- \left(\bar{\tau}^{11} \tilde{\mathbf{T}}_{12}^c + \bar{\tau}^{12} \tilde{\mathbf{T}}_{22}^c \right) \mathbf{T}_1^{cT} - \left(\bar{\tau}^{21} \tilde{\mathbf{T}}_{12}^c + \bar{\tau}^{22} \tilde{\mathbf{T}}_{22}^c \right) \mathbf{T}_2^{cT}, \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

und mit den weiteren Abkürzungen

$$\mathbf{g}_T^\alpha = \hat{\theta}_{n+1}^\alpha - \hat{\theta}_n^\alpha, \quad \kappa_{T\alpha} = \boldsymbol{\tau}_{1,2} \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha \quad (\text{A.45})$$

die Haft–Reibsteifigkeitsmatrix

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_T^{\text{Haft}} &= \epsilon_T \left[\tau_{11} \mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_1^{cT} + \tau_{12} \left(\mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_2^{cT} + \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_1^{cT} \right) + \tau_{22} \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_2^{cT} \right. \\ &+ \kappa_{T1} g_T^2 \mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_1^{cT} + \left(2\kappa_{T1} g_T^1 + \kappa_{T2} g_T^2 \right) \mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_2^{cT} \\ &\left. + \left(2\kappa_{T2} g_T^2 + \kappa_{T1} g_T^1 \right) \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_1^{cT} + \kappa_{T2} g_T^1 \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_2^{cT} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

und die Gleit–Reibsteifigkeitsmatrix

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_T^{Gleit} = & -\mu \epsilon_N H(g) (\pi_{T1} \mathbf{D}_1^c + \pi_{T2} \mathbf{D}_2^c) \mathbf{N}^{cT} \\
& + \frac{\epsilon_T \mu t_N}{\|\mathbf{t}_T^{pred}\|} \{ \\
& \left[(1 - \pi_T^1 \pi_{T1}) (\tau_{11} + \kappa_{T1} g_T^2) - \pi_T^2 \pi_{T1} (\tau_{12} + 2\kappa_{T2} g_T^2 + \kappa_{T1} g_T^1) \right] \mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_1^{cT} \\
& + \left[(1 - \pi_T^2 \pi_{T2}) (\tau_{12} + 2\kappa_{T2} g_T^2 + \kappa_{T1} g_T^1) - \pi_T^1 \pi_{T2} (\tau_{11} + \kappa_{T1} g_T^2) \right] \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_1^{cT} \\
& + \left[(1 - \pi_T^1 \pi_{T1}) (\tau_{12} + 2\kappa_{T1} g_T^1 + \kappa_{T2} g_T^2) - \pi_T^2 \pi_{T1} (\tau_{22} + \kappa_{T2} g_T^1) \right] \mathbf{D}_1^c \mathbf{D}_2^{cT} \\
& \left[(1 - \pi_T^2 \pi_{T2}) (\tau_{22} + \kappa_{T2} g_T^1) - \pi_T^1 \pi_{T2} (\tau_{12} + 2\kappa_{T1} g_T^1 + \kappa_{T2} g_T^2) \right] \mathbf{D}_2^c \mathbf{D}_2^{cT} \} \\
& - \mu t_N (\pi_T^1 \pi_{T1} \mathbf{D}_1^c \tilde{\mathbf{H}}_1^{cT} + \pi_T^1 \pi_{T2} \mathbf{D}_2^c \tilde{\mathbf{H}}_1^{cT} + \pi_T^2 \pi_{T1} \mathbf{D}_1^c \tilde{\mathbf{H}}_2^{cT} + \pi_T^2 \pi_{T2} \mathbf{D}_2^c \tilde{\mathbf{H}}_2^{cT}) .
\end{aligned} \tag{A.47}$$

Alle angegebenen Größen gehen von der Penalty–Regularisierung (Kap. 7.3.1) der Kuhn–Tucker Bedingungen des Normalkontakts sowie der Coulombschen Reibung aus.

A4.2 Schema der Augmented–Lagrange–Regularisierung im Rahmen der Generalized– α Zeitintegration

Für die Regularisierung mit der Methode der Augmented–Lagrange–Multiplikatoren im Rahmen der Generalized– α Zeitintegration lässt sich für ein Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ folgendes dreiteilige Schema anwenden:

- 1. Schritt: Initialisierungsphase

Als Prediktor der Lagrange–Multiplikatoren werden die Werte des letzten Zeitschritts gewählt:

$$\lambda_{Nn+1}^k = \lambda_{Nn} \quad , \quad \lambda_{Tan+1}^k = \lambda_{Tan} \quad , \quad k = 0 . \tag{A.48}$$

- 2. Schritt: Lösungsphase

Löse für die Verschiebungen \mathbf{d}_{n+1}^k in der k -ten Augmentierungsiteration mit festgehaltenen Multiplikatoren λ_{Nn+1}^k und λ_{Tan+1}^k das dynamische Gleichgewicht

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{d}}_{n+1-\alpha_m} + \mathbf{f}_{n+1-\alpha_f}^{int} + \mathbf{f}_{n+1-\alpha_f}^c - \mathbf{f}_{n+1-\alpha_f}^{ext} = \mathbf{0} , \tag{A.49}$$

mit

$$\mathbf{f}_{n+1-\alpha_f}^c = (1 - \alpha_f) \mathbf{f}_{n+1}^c + \alpha_f \mathbf{f}_n^c \tag{A.50}$$

und f_{n+1}^c aus der Integration und Assemblierung der Kontaktkräfte, die sich aus folgenden Beziehungen ergeben:

$$t_{Nn+1}^k = \langle \lambda_{Nn+1}^k + \epsilon_N g_{n+1}^k \rangle ,$$

$$t_{T\alpha n+1}^k = \lambda_{T\alpha n+1}^k + \epsilon_T \left[\bar{v}_{\alpha\beta} \left(\hat{\xi}_{n+1}^{\beta k} - \hat{\xi}_n^\beta \right) - \dot{\gamma} \frac{t_{T\alpha n+1}^k}{\left(t_{T\beta n+1}^k \bar{v}^{\beta\gamma} t_{T\gamma n+1}^k \right)^{\frac{1}{2}}} \right] , \quad (\text{A.51})$$

$$\Phi(t_{T\alpha n+1}^k, t_{Nn+1}^k) \leq 0 , \quad \dot{\gamma} \geq 0 , \quad \dot{\gamma} \Phi(t_{T\alpha n+1}^k, t_{Nn+1}^k) = 0 .$$

Verwende hierzu die Kontaktsteifigkeitsmatrizen aus Anhang A4.1, in denen jedoch der Term $H(g)$ durch $H(\lambda_N^k + \epsilon_N g)$ ersetzt wird.

- **3. Schritt: Aktualisierungsphase**

Aktualisierung die Lagrange-Multiplikatoren:

$$\lambda_{Nn+1}^{k+1} = t_{Nn+1}^k , \quad \lambda_{T\alpha n+1}^{k+1} = t_{T\alpha n+1}^k , \quad k \leftarrow k + 1 . \quad (\text{A.52})$$

Wiederhole die Schritte 2 und 3 für eine fixe Anzahl an Iterationen (in numerischen Versuchen hat sich $k < 3$ als ausreichend herausgestellt) oder bis alle Klaffungen g eine vorgegebene Toleranz unterschreiten.

Lebenslauf

Name: *Michael Wolfgang Gee*

Geburtsdatum: *20. Mai 1971 in Hamburg*

Eltern: *Dr.-Ing. Colin und Monika Gee, geb. Rüge*

Familienstand: *Seit 23.7.1999 verheiratet mit Kerstin Dübner-Gee, geb. Dübner,
Sohn Leon Samuel Gee geboren am 22.11.1999*

1978 – 1982 *Besuch der Grundschule in Stetten auf den Fildern und in Ostfildern*

1982 – 1988 *Besuch des Heinrich-Heine Gymnasiums in Ostfildern*

1988 – 1990 *Besuch des Georgii Gymnasiums in Esslingen am Neckar*

Juni 1990 *Abitur*

1990 – 1992 *Zivildienst in Stuttgart*

1992 – 1999 *Studium des Bauingenieurwesens
an der Universität Stuttgart*

März 1999 *Abschluss als Diplom-Ingenieur*

April 1999 –
März 2004 *angestellt als wissenschaftlicher Mitarbeiter
am Institut für Baustatik der Universität Stuttgart*

Juli 2004 *Promotion*

August 2004 *angestellt als wissenschaftlicher Mitarbeiter
bei Sandia National Laboratories, Albuquerque*

Berichte des Instituts für Baustatik der Universität Stuttgart

- 1 (1983) P. Osterrieder:**
Traglastberechnung von räumlichen Stabwerken bei großen Verformungen mit finiten Elementen.
- 2 (1983) T. A. Kompfner:**
Ein finites Elementmodell für die geometrisch und physikalisch nichtlineare Berechnung von Stahlbetonschalen.
- 3 (1983) A. Diack:**
Beitrag zur Stabilität diskret längsversteifter Kreiszyinderschalen unter Axialdruck.
- 4 (1984) A. Burmeister, F. W. Bornscheuer, E. Ramm:**
Traglasten von Kugelbehältern mit Stützen und Formabweichungen unter Innendruck und Stützenlängskraft.
- 5 (1985) H. Stegmüller:**
Grenzlastberechnungen flüssigkeitsgefüllter Schalen mit „degenerierten“ Schalenelementen.
- 6 (1987) A. Burmeister:**
Dynamische Stabilität nach der Methode der finiten Elemente mit Anwendungen auf Kugelschalen.
- 7 (1987) G. Kammler:**
Ein finites Elementmodell zur Berechnung von Trägern und Stützen mit offenem, dünnwandigem Querschnitt unter Berücksichtigung der Interaktion zwischen globalem und lokalem Versagen.
- 8 (1988) A. Matzenmiller:**
Ein rationales Lösungskonzept für geometrisch und physikalisch nichtlineare Strukturberechnungen.
- 9 (1989) D. Tao:**
Die Technik der reduzierten Basis bei nichtlinearen finiten Element-Berechnungen.
- 10 (1989) K. Weimar:**
Ein nichtlineares Balkenelement mit Anwendung als Längsstreifen axialbelasteter Kreiszyylinder.
- 11 (1990) K.-U. Bletzinger:**
Formoptimierung von Flächentragwerken.
- 12 (1990) S. Kimmich:**
Strukturoptimierung und Sensibilitätsanalyse mit finiten Elementen.
- 13 (1991) U. Andelfinger:**
Untersuchungen zur Zuverlässigkeit hybrid-gemischter finiter Elemente für Flächentragwerke.

- 14 (1992) N. Büchter:**
Zusammenführung von Degenerationskonzept und Schalentheorie bei endlichen Rotationen.
- 15 (1992) Th. J. Hofmann:**
Beitrag zur verfeinerten Balkentheorie.
- 16 (1994) D. Roehl:**
Zur Berechnung von großen elastoplastischen Deformationen bei Flächentragwerken und Kontinua.
- 17 (1994) R. Reitinger:**
Stabilität und Optimierung imperfektionsempfindlicher Tragwerke.
- 18 (1995) R. Suanno:**
Ein dreidimensionales Simulationsmodell für Stahlbeton mit Plastizität und Schädigung.
- 19 (1995) M. Braun:**
Nichtlineare Analysen von geschichteten, elastischen Flächentragwerken.
- 20 (1996) N. Rehle:**
Adaptive Finite Element Verfahren bei der Analyse von Flächentragwerken.
- 21 (1996) C. Haußer:**
Effiziente Dreieckselemente für Flächentragwerke.
- 22 (1996) D. Kuhl:**
Stabile Zeitintegrationsalgorithmen in der nichtlinearen Elastodynamik dünnwandiger Tragwerke.
- 23 (1998) H. Schmidts:**
Zur effizienten Modellierung und Analyse von Hochhaustragwerken.
- 24 (1998) H. Wang:**
Interaktion des lokalen und globalen Stabilitätsverhaltens dünnwandiger Stäbe.
- 25 (1998) K. Maute:**
Topologie- und Formoptimierung von dünnwandigen Flächentragwerken.
- 26 (1998) B. Maurer:**
Karl Culmann und die graphische Statik.
- 27 (1998) F. Çirak:**
Adaptive Finite-Element-Methoden bei der nichtlinearen Analyse von Flächentragwerken.
- 28 (1998) M. Trautz:**
Zur Entwicklung von Form und Struktur historischer Gewölbe aus der Sicht der Statik.

- 29 (1999) H. Menrath:**
Numerische Simulation des nichtlinearen Tragverhaltens von Stahlverbundträgern.
- 30 (1999) M. Bischoff:**
Theorie und Numerik einer dreidimensionalen Schalenformulierung.
- 31 (1999) W. A. Wall:**
Fluid-Struktur-Interaktion mit stabilisierten finiten Elementen.
- 32 (2000) E. Kuhl:**
Numerische Modelle für kohäsive Reibungsmaterialien.
- 33 (2001) A. Maute:**
Adaptive Finite-Element-Methoden in der Strukturmechanik.
- 34 (2001) S. Schwarz:**
Sensitivitätsanalyse und Optimierung bei nichtlinearem Strukturverhalten.
- 35 (2001) A. Haufe:**
Dreidimensionale Simulation bewehrter Flächentragwerke aus Beton mit der Plastizitätstheorie.
- 36 (2002) D.P. Mok:**
Partitionierte Lösungsverfahren in der Strukturmechanik und der Fluid-Struktur-Interaktion.
- 37 (2002) H. Steeb:**
Fehlerschätzer für FE-Berechnungen bei entfestigenden Materialien.
- 38 (2002) K. Krausz:**
Tragverhalten gemauerter Tonnengewölbe mit Stichkappen.
- 39 (2002) M. Hörmann**
Nichtlineare Versagensanalysen von Faserverbundstrukturen
- 40 (2003) V. Gravemeier**
The Variational Multiscale Method for Laminar and Turbulent Incompressible Flow.
- 41 (2004) R. Kemmler**
Stabilität und große Verschiebungen in der Topologie- und Formoptimierung.
- 42 (2004) G. D'Addetta**
Discrete Models for Cohesive Frictional Materials.
- 43 (2004) M. Gee**
Effiziente Lösungsstrategien in der nichtlinearen Schalenmechanik.



Universität Stuttgart

